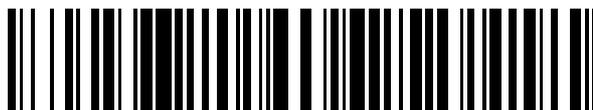


19



OFICINA ESPAÑOLA DE
PATENTES Y MARCAS

ESPAÑA



11 Número de publicación: **2 592 564**

51 Int. Cl.:

A61K 8/37 (2006.01)
C07H 15/04 (2006.01)
C11D 1/66 (2006.01)
C11D 3/22 (2006.01)
A61K 8/60 (2006.01)
A61Q 5/02 (2006.01)
A61Q 19/10 (2006.01)

12

TRADUCCIÓN DE PATENTE EUROPEA

T3

- 86 Fecha de presentación y número de la solicitud internacional: **05.06.2013 PCT/US2013/044198**
- 87 Fecha y número de publicación internacional: **19.12.2013 WO13188183**
- 96 Fecha de presentación y número de la solicitud europea: **05.06.2013 E 13729211 (6)**
- 97 Fecha y número de publicación de la concesión europea: **31.08.2016 EP 2861204**

54 Título: **Espesantes micelares a base de alquilglucósido para sistemas tensioactivos**

30 Prioridad:

15.06.2012 US 201261660206 P

45 Fecha de publicación y mención en BOPI de la traducción de la patente:
30.11.2016

73 Titular/es:

**LUBRIZOL ADVANCED MATERIALS, INC.
(100.0%)
9911 Brecksville Road
Cleveland, OH 44141-3247, US**

72 Inventor/es:

**GALLEGUILLOS, RAMIRO y
WU, ANCHUU**

74 Agente/Representante:

UNGRÍA LÓPEZ, Javier

ES 2 592 564 T3

Aviso: En el plazo de nueve meses a contar desde la fecha de publicación en el Boletín Europeo de Patentes, de la mención de concesión de la patente europea, cualquier persona podrá oponerse ante la Oficina Europea de Patentes a la patente concedida. La oposición deberá formularse por escrito y estar motivada; sólo se considerará como formulada una vez que se haya realizado el pago de la tasa de oposición (art. 99.1 del Convenio sobre Concesión de Patentes Europeas).

DESCRIPCIÓN

Espesantes micelares a base de alquilglucósido para sistemas tensioactivos

5 **Campo de la invención**

La presente realización se refiere a modificadores de la reología, y encuentra particular aplicación en relación con un compuesto de glucósido esterificado y una composición a base de tensioactivos que incluye el compuesto.

10 **Antecedentes**

Las composiciones acuosas líquidas que contienen tensioactivos, tales como los champús, los jabones líquidos, los jabones corporales, los limpiadores faciales, y otros productos para el cuidado personal, farmacéuticos e industriales, normalmente contienen espesantes con el fin de aumentar la viscosidad de la composición líquida. Esto garantiza la administración y la manipulación convenientes del producto formulado.

Los espesantes tradicionales que se han usado en dichos compuestos incluyen una diversidad de polímeros sintéticos aniónicos, catiónicos y no iónicos, tales como poliácridatos carboxilados y cuaternizados, y compuestos de polivinilo. Los polímeros sintéticos no iónicos típicos incluyen polivinilpirrolidona, polietilenglicol (PEG) y polioles alcoxilados que contienen sustituyentes lipófilos, tales como diestearato de PEG150 y metilglucósido etoxilado esterificado con ácidos grasos. Otros espesantes que se han usado incluyen gomas aniónicas y catiónicas de origen natural, tales como la celulosa modificada químicamente, la goma de xantano, la goma de tara y la goma guar, y una variedad de arcillas inorgánicas, sales y electrolitos. En el Diccionario y Manual Internacional de Ingredientes Cosméticos de "International Cosmetic Ingredient Dictionary and Handbook", páginas 3974-3977, 14ª Edición, Personal Care Products Council Publisher, Washington, DC, EE.UU. (2012), se puede encontrar una lista exhaustiva de modificadores de la reología. En E. Desmond Goddard, "Principles of Polymer Science and Technology in Cosmetics and Personal Care", Cosmetic Science and Technology, 1ª Edición (10 de marzo de 1999), Informa HealthCare, y en "Polymers in Aqueous Media - Performance through Association", J. E. Glass, Editor, Advances in Chemistry Series n.º 223, American Chemical Society, Washington DC (1989), se describe información adicional sobre los mecanismos físicos y químicos a través de los cuales los diferentes espesantes confieren viscosidad a las composiciones tensioactivas.

Un grupo de espesantes no iónicos incluye compuestos de peso molecular relativamente bajo de diversos tipos, tales como tensioactivos no iónicos alcoxilados, amidas alifáticas, alcoholes grasos, moléculas alcoxiladas modificadas hidrófobamente, que son capaces de proporcionar una mayor viscosidad a las composiciones líquidas a base de tensioactivos. Se cree que el mecanismo a través del cual estos compuestos aumentan la viscosidad de las composiciones acuosas de tensioactivos es mediante la asociación selectiva con las propias micelas de tensioactivo. Estos compuestos se suelen denominar espesantes asociativos o espesantes micelares, ya que se espesan través de la asociación con un tensioactivo, tal vez a través de sustituyentes hidrófobos o lipófilos en estas pequeñas moléculas.

La preparación de polímeros alcoxilados modificados con ácidos grasos usando polioles de azúcar se divulga, por ejemplo, en las patentes de EE.UU. n.º 4.252.826; 4.264.478; 4.323.468; 4.324.703; 4.364.930; 4.687.843; 4.708.813; 5.744.062; 6.320.065; 6.727.357; 6.808.701 y 7.297.667, y la patente europea EP1329255. En las publicaciones de patente n.º 20010051142; 20020123625; 20020165104; 20030095942; 20030108506; 20030130162; 20030158065; 20030181715; 20030194387; 20040048766; 20040057921; 20040062730; 20040081632; 20040086470; 20040136943; 40 20050164896; y 20060019861, se divulgan polímeros de glucósidos alcoxilados que han sido modificados hidrófobamente con una variedad de hidrocarburos.

Un problema con el uso de dichos compuestos como agentes espesantes es que tienden a tener características que los hacen menos atractivos para su uso en productos de cuidado personal humano. Por ejemplo, normalmente se preparan a partir de precursores derivados del petróleo, y como tales, no se consideran materiales ambientalmente aceptables o renovables. Además, un número de ellos son compuestos etoxilados. Debido a la presencia de dioxano residual en el producto como resultado del procedimiento de preparación, hay preocupación acerca de su toxicidad. Del mismo modo, las aminas alifáticas tales como la cocamida-DEA y otras pueden contener aminas residuales que se cree que forman nitrosaminas durante la vida útil del producto, que se consideran carcinógenas. Por lo tanto, estos espesantes convencionales pueden no ser adecuados para su uso en composiciones limpiadoras líquidas acuosas a base de tensioactivos para el cuidado personal, en las que se desea tener una concentración lo más alta posible de ingredientes de origen natural o renovables.

Se ha estudiado la esterificación de los polioles tales como los azúcares o los sacáridos tales como glucosa, manosa, galactosa, fructosa, sacarosa, maltosa, lactosa, almidón, celulosa y sus derivados, incluyendo sorbitol, sorbitán y poliglucósido de alquilo. En las solicitudes PCT WO/1992/003060 y WO/2004/031244, se divulgan ejemplos de ésteres de ácidos grasos formados a partir de estos azúcares, donde los ésteres resultantes son mezclas complejas de poliésteres que se usan como sustitutos de las grasas en productos alimenticios. Como posibles componentes espesantes de una composición para el cuidado personal a base de tensioactivos, sin

embargo, estos materiales esterificados tienen algunas desventajas. Los propios polioles normalmente son mezclas de diversos azúcares inestables. Por lo tanto, la calidad del producto esterificado resultante tiende a ser baja. Además, el poliol tiende a descomponerse, sufriendo formas significativas de reordenamiento durante la esterificación a temperaturas superiores a 130 °C, incluyendo la oligomerización, la caramelización o incluso la carbonización. Esto da lugar a productos oscuros, descoloridos, que contienen niveles significativos de polisacáridos y de otras especies insolubles. Para hacer frente a la inestabilidad de estos azúcares comunes, se han propuesto las enzimas catalíticas, que permiten efectuar la esterificación en condiciones de reacción más suaves, según lo divulgado en el documento EP 0 507 323. Sin embargo, los rendimientos de los ésteres usando enzimas como catalizadores tienden a ser muy bajos, haciéndolos no adecuados para la producción comercial de dichos compuestos.

Las publicaciones de EE.UU. n.º 20120015893 y EP 2 415 454 A1, por ejemplo, divulgan ésteres de sorbitán, tales como sesquicaprilato de sorbitán, en una composición de limpieza tal como un champú. La publicación de EE.UU. n.º 20110092405 divulga composiciones tensioactivas para formulaciones de limpieza espesadas con ésteres de ácidos grasos de glicerol. Ambos polioles tienen algún problema de estabilidad.

La publicación de EE.UU. n.º 20060024256 divulga el uso de anfífilos grasos en composiciones tensioactivas, pero requiere que los anfífilos se incorporen a una fase reticular de gel dispersa para poder ser eficaces.

La realización ilustrativa proporciona un espesante micelar adecuado como modificador de la reología en composiciones a base de tensioactivos.

El documento WO 90/09451 divulga un proceso enzimático de preparación de ésteres de ácidos grasos de glucósido. Las composiciones usadas comprenden además un tensioactivo y agua. La esterificación se lleva a cabo en presencia de una mezcla de ácidos grasos de coco que comprende el 1 % de ácido decanoico y el 82 % en peso de ácidos grasos $\leq C_{12}$.

Breve descripción

Las realizaciones de la invención son las siguientes:

1. Una composición que comprende:

un tensioactivo;

un modificador de la reología que comprende una mezcla de ésteres de ácidos grasos de alquilglucósido que comprende:

un éster de ácido graso de cadena larga de un alquilglucósido, consistiendo el éster de ácido graso de cadena larga en al menos un grupo éster de ácido graso $R^1(O)O-$, donde R^1 es un hidrocarburo C_{12} o superior, y

un éster de ácido graso de cadena corta de un alquilglucósido, consistiendo el éster de ácido graso de cadena corta en al menos un grupo éster de ácido graso $R^2(O)O-$, donde R^2 es un hidrocarburo C_6-C_{10} ; y

agua;

donde la proporción molar de los grupos éster de ácido graso de cadena larga con respecto a los grupos éster de ácido graso de cadena corta del modificador de la reología es inferior a 1:1.

2. La composición de la realización 1, donde, en el éster de ácido graso de cadena larga, R^1 es un hidrocarburo $C_{12}-C_{23}$.

3. La composición de la realización 1, donde, en el éster de ácido graso de cadena larga, R^1 es un hidrocarburo C_{13} o superior.

4. La composición de la realización 1, donde el ácido graso de cadena larga comprende al menos un éster de ácido graso, donde R^1 es un hidrocarburo C_{18} .

5. La composición de la realización 1, donde el éster de ácido graso de cadena larga comprende al menos un éster de ácido graso, donde R^1 es un hidrocarburo insaturado.

6. La composición de la realización 1, donde el éster de ácido graso de cadena larga comprende un grupo éster de ácido graso de origen vegetal derivado de al menos uno de ácido linoleico, ácido linolénico, ácido oleico, ácido esteárico y ésteres de los mismos.

7. La composición de la realización 1, donde el éster de ácido graso de cadena corta comprende al menos un grupo éster de ácido graso $R^2(O)O-$, donde R^2 es un hidrocarburo C_8-C_{10} .

8. La composición de la realización 1, donde el éster de ácido graso de cadena corta comprende al menos un éster de ácido graso basado en plantas derivado de ácidos cáprico y caprílico o ésteres de los mismos.

9. La composición de la realización 1, donde el éster de ácido graso de cadena corta comprende al menos uno de hexanoato, heptanoato, caprilato, pelargonato y caprato, metilglucósido, y combinaciones de los mismos, y el éster de glucósido de cadena larga comprende al menos uno de laurato, palmitato de miristilo, estearato,

isoestearato, linoleato, linolenato, oleato y behenato de metilglucósido, y combinaciones de los mismos.

10. La composición de la realización 9, donde el modificador de la reología comprende ésteres de glucósido de alquilo derivados de ácido caprílico, ácido cáprico y ácido oleico de origen vegetal, o sus ésteres.

11. La composición de la realización 1, donde una proporción de los grupos éster de ácido graso de cadena larga con respecto a los grupos éster de ácido graso de cadena corta del modificador de la reología es inferior a 0,1:1.

12. La composición de la realización 11, donde la proporción de los grupos éster de ácido graso de cadena larga con respecto a los grupos éster de ácido graso de cadena corta del modificador de la reología es inferior a 0,2:1.

13. La composición de la realización 11, donde la proporción de los grupos éster de ácido graso de cadena larga con respecto a los grupos éster de ácido graso de cadena corta del modificador de la reología es de al menos 0,3:1.

14. La composición de la realización 1, donde la proporción de los grupos éster de ácido graso de cadena larga con respecto a los grupos éster de ácido graso de cadena corta del modificador de la reología es de hasta 0,8:1.

15. La composición de la realización 14, donde la proporción molar de los grupos éster de ácido graso de cadena larga con respecto a los grupos éster de ácido graso de cadena corta del modificador de la reología es de hasta 0,7:1.

16. La composición de la realización 1, donde la proporción molar de los grupos éster de ácido graso de cadena larga con respecto a los grupos éster de ácido graso de cadena corta del modificador de la reología es de 0,2:1 a 0,8:1.

17. La composición de la realización 1, donde el éster de ácido graso de cadena larga comprende grupos éster oleico de origen vegetal y el éster de ácido graso de cadena corta comprende grupos éster caprílico y cáprico, y donde una proporción molar de los grupos éster C₁₈ insaturados con respecto a otros grupos éster (proporción de O/CC) es de 0,2:1 a 0,7:1.

18. La composición de la realización 17, donde la proporción de O/CC es de 0,35:1 a 0,6:1.

19. La composición de la realización 1, donde un grado de esterificación por molécula de glucósido es de 0,7:1 a 1,5:1.

20. La composición de la realización 19, donde el grado de esterificación es de 0,8:1 a 1,2:1.

21. La composición de la realización 1, donde el alquilglucósido comprende un glucósido de alquilo.

22. La composición de la realización 21, donde el glucósido de alquilo es un glucósido de alquilo C₁-C₃₀.

23. La composición de la realización 22, donde el glucósido de alquilo comprende metilglucósido.

24. La composición de la realización 1, donde los ésteres de ácidos grasos de alquilglucósido tienen un peso molecular inferior a 1.000.

25. La composición de la realización 1, que comprende además un disolvente no acuoso.

26. La composición de la realización 1, donde el modificador de la reología aumentó la viscosidad de la composición en al menos 10 veces cuando los ésteres de ácidos grasos de alquilglucósido estaban a una concentración total de hasta el 4 % en peso de la composición tensioactiva, en comparación con una composición por lo demás idéntica sin el modificador de la reología.

27. La composición de la realización 1, donde ninguno de los ésteres de ácidos grasos de alquilglucósido del modificador de la reología está alcoxlado.

28. La composición de la realización 1, donde el modificador de la reología está presente a una concentración de al menos el 0,1 % en peso.

29. La composición de la realización 28, donde el modificador de la reología está presente a una concentración de al menos el 0,5 % en peso.

30. La composición de la realización 29, donde el modificador de la reología está presente a una concentración de al menos el 1 % en peso.

31. La composición de la realización 1, donde el modificador de la reología está presente a una concentración de hasta el 5 % en peso.

32. La composición de la realización 31, donde el modificador de la reología está presente a una concentración de hasta el 3 % en peso.

33. La composición de la realización 1, donde el tensioactivo está presente a una concentración de al menos el 0,01 % en peso.

34. La composición de la realización 32, donde el tensioactivo está presente a una concentración de al menos el 1 % en peso.

35. La composición de la realización 1, donde el tensioactivo está presente a una concentración de hasta el 20 % en peso.

36. La composición de la realización 1, donde una proporción en peso de los ésteres de ácidos grasos de alquilglucósido con respecto al tensioactivo es inferior a 1:1.

37. La composición de la realización 1, donde una proporción en peso de los ésteres de ácidos grasos de alquilglucósido con respecto al tensioactivo es de hasta 0,5:1.

38. La composición de la realización 1, donde el tensioactivo comprende un tensioactivo aniónico.

39. La composición de la realización 38, donde el tensioactivo comprende además un tensioactivo zwitteriónico.

40. La composición de la realización 1, donde la composición está exenta de tensioactivos alcoxlados.

41. La composición de la realización 1, donde la composición está exenta de tensioactivos a base de sulfatos.

42. La composición de la realización 1, donde el modificador de la reología no está alcoxlado.

43. La composición de la realización 1, que comprende además al menos el 0,1 % de una sal seleccionada entre sales inorgánicas solubles y sales orgánicas que tienen un peso molecular inferior a 300.

44. La composición de la realización 43, donde la sal comprende una sal inorgánica soluble.

45. La composición de la realización 44, donde la composición comprende al menos el 0,2 % de la sal inorgánica soluble.

46. La composición de la realización 1, donde la composición comprende al menos el 40 % en peso de agua.

5 47. La composición de la realización 1, donde la composición tiene una viscosidad de al menos 1.000 mPa.s, cuando se mide a las 24 horas de la formación de la composición.

48. La composición de la realización 47, donde la composición tiene una viscosidad de al menos 2.000 mPa.s, medida a 20 °C, 24 horas después de la formación de la composición.

49. La composición de la realización 47, donde la composición tiene una viscosidad de hasta 10.000 mPa.s, medida a 20 °C, 24 horas después de la formación de la composición.

10 50. La composición de la realización 1, donde la composición tiene una turbidez inferior a 60 UTN, medida a las 24 horas de la formación de la composición.

51. La composición de la realización 50, donde la composición tiene una turbidez inferior a 30 UTN, a las 24 horas de la formación.

15 52. La composición de la realización 1, donde la composición se forma mezclando el tensioactivo y el modificador de la reología con agua a temperatura ambiente.

53. La composición de la realización 1, que comprende además al menos una de entre siliconas, emolientes, siliconas, emulsionantes, agentes nacarados, agentes colorantes, partículas, conservantes, agentes de ajuste del pH, productos botánicos, agentes quelantes, agentes antimicrobianos y modificadores auxiliares de la reología.

20 54. La composición de la realización 1, donde la composición se formula para una aplicación de cuidado personal seleccionada entre un champú, un jabón corporal, un jabón líquido, un limpiador facial y un jabón de manos.

55. Una composición que comprende un modificador de la reología derivado de una reacción de un alquilglucósido con un ácido graso de cadena larga o derivado del mismo y un ácido graso de cadena corta o derivado del mismo, incluyendo los ácidos grasos de cadena corta o de cadena larga, o sus derivados, una cadena de hidrocarburo de al menos 6 átomos de carbono de longitud, y donde los ácidos grasos de cadena corta y de cadena larga, o sus derivados, difieren en la longitud de sus respectivas cadenas de hidrocarburo en una media de al menos 6 átomos de carbono, donde una proporción molar del ácido graso de cadena larga o su derivado con respecto al ácido graso de cadena corta o su derivado es inferior a 1:1.

56. La composición de la realización 55, que comprende además un tensioactivo.

30 57. La composición de las realizaciones 55 y 56, que comprende además agua.

Breve descripción del dibujo

La FIG. 1 es un gráfico que muestra la viscosidad de MeG-CCO (Ejemplo G) en Zemea al 20 %, usando un viscosímetro Brookfield DV-II+ Pro y SPDL SC4-27, que gira a 20 rpm; a 20 °C.

Descripción detallada

Las realizaciones divulgadas en el presente documento se refieren a un modificador de la reología y a composiciones acuosas basadas en tensioactivos espesadas con el modificador de la reología. El modificador de la reología ilustrativo divulgado en el presente documento es una mezcla de ésteres de ácidos grasos de cadena corta y larga de un alquilglucósido.

El modificador de la reología de ejemplo puede encontrar uso en productos para el cuidado personal tales como productos de limpieza para el cuidado personal, cosméticos, artículos de tocador, productos de belleza, repelentes de insectos, productos de higiene personal, productos de limpieza del hogar y similares. El modificador de la reología encuentra un uso particular en las composiciones acuosas líquidas que contienen tensioactivos que son útiles en la formulación de productos de limpieza para el cuidado personal destinados a su aplicación en el cuerpo, incluyendo la piel, el cabello, el cuero cabelludo y las uñas de los seres humanos y los animales. Los ejemplos de dichos productos de limpieza para el cuidado personal incluyen champús, jabones líquidos, jabones corporales, limpiadores faciales (incluidos productos faciales que requieren aclarado) y similares. Sin embargo, el modificador de la reología ilustrativo también puede encontrar aplicación en otras aplicaciones de limpieza de superficies o en el mantenimiento de las condiciones sanitarias del hogar o de entornos institucionales e industriales, en tratamientos textiles (por ejemplo, acondicionadores textiles, y limpiadores de alfombras y tapicerías), el cuidado del automóvil (por ejemplo, detergentes para el lavado manual y automático de automóviles, abrillantadores de neumáticos, acondicionadores de cuero, pulimentos líquidos para automóviles, pulimentos plásticos y acondicionadores), pinturas y recubrimientos, y similares.

Las realizaciones divulgadas en el presente documento proporcionan un eficaz modificador de la reología, no polimérico, adecuado para su uso en composiciones de limpieza acuosas a base de tensioactivos, que pueden estar exentas de óxido de alquileo (por ejemplo, óxido de etileno), por ejemplo, exentas de polietilenglicol (PEG), y que se pueden fabricar completamente a partir de materiales de partida de origen vegetal, seguros y renovables, que se consideran "verdes". Por "exenta de óxido de alquileo", se entiende que la composición de limpieza acuosa a base de tensioactivos incluye menos del 1 % en peso de poli(óxido de alquileo), tal como no más del 0,1 % en peso o del 0,01 % en peso. Los ésteres de ácidos grasos de los glucósidos de alquilo tales como metilglucósido son compatibles con una serie de tensioactivos aniónicos, zwitteriónicos y no iónicos, así como con electrolitos y una serie de adyuvantes de formulación normalmente usados en la preparación de composiciones tensioactivas

acuosas.

5 Sin quedar limitados a teoría alguna, se cree que los modificadores de la reología ilustrativos divulgados en el presente documento aumentan la viscosidad de las composiciones acuosas tensioactivas mediante la asociación con las micelas de tensioactivo y, por lo tanto, se pueden considerar espesantes asociativos o espesantes micelares.

10 Los glucósidos ilustrativos, tales como los metilglucósidos, tienen una alta estabilidad, en comparación con los azúcares no sustituidos, cuando se usan en la formación de ésteres de ácidos grasos. El modificador de la reología tiene una alta transparencia, por lo que es particularmente útil en productos de cuidado personal.

MODIFICADOR DE LA REOLOGÍA

15 El modificador de la reología ilustrativo incluye ésteres de ácidos grasos de un glucósido, que se pueden denominar en el presente documento ésteres de glucósido, siendo un ejemplo específico de los cuales los ésteres de metilglucósido, que son ésteres de ácidos grasos de metilglucósido (MeG). Para facilitar la descripción, se puede considerar que el modificador de la reología incluye un componente de glucósido derivado de una molécula de glucósido o "núcleo", y un componente de ácido graso, que comprende uno o más grupos de ácidos grasos enlazados a cada molécula de glucósido, comprendiendo los grupos de ácido graso grupos de ácido graso derivados del primer y del segundo ácido graso A y B, que difieren en la longitud de sus cadenas.

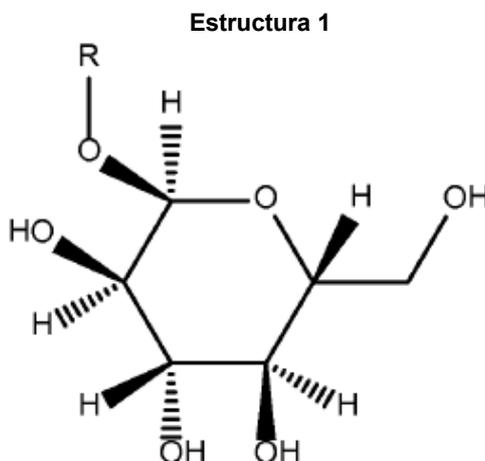
1. COMPONENTE DE GLICÓSIDO

25 Los glucósidos ilustrativos para formar el modificador de la reología comprenden una molécula de azúcar (normalmente un monómero), que se une a un resto no de hidrato de carbono a través del átomo carbono anomérico y, en particular, a través de un enlace de oxígeno. Los glucósidos ilustrativos son glucósidos (glucósidos derivados de la glucosa), aunque también se contemplan otros glucósidos tales como glucósidos de otros monosacáridos cíclicos, particularmente otras hexosas cíclicas tales como galactósidos y fructósidos, más particularmente, hexosas cíclicas que tienen un anillo de seis miembros.

30 Los restos no de hidrato de carbono ilustrativos que se pueden unir a la molécula de azúcar mediante un enlace covalente incluyen grupos alquilo. Un alquilglucósido se refiere, en general, a un glucósido donde el grupo alquilo está unido mediante un enlace glicosídico al átomo de carbono anomérico. Los grupos alquilo ilustrativos incluyen como alquilo C_1 - C_{30} lineales y ramificados, en particular, alquilo C_1 - C_{10} tales como metilo, etilo, propilo, butilo, pentil(amilo) y mezclas de los mismos. Los glucósidos de alquilo ilustrativos son glucósidos de alquilo C_1 - C_{10} de cadena corta tales como metilglucósido, etilglucósido, glucósido propilo, glucósido de butilo u glucósido de pentilo. Si bien se hace especial referencia en el presente documento a los glucósidos de alquilo tales como el metilglucósido (MeG), como glucósidos ilustrativos, se ha de apreciar que también se contemplan otros glucósidos.

40 Una ventaja de los glucósidos es que tienden a ser polioles hidrolítica y térmicamente estables que contienen más del 95 % en peso de monosacárido. Sin embargo, se ha de apreciar que el poliol puede incluir una mayor proporción de polioles que incluyen polisacáridos (disacáridos y superiores). En general, una proporción de glucósido en la forma de monosacárido con respecto a la forma de polisacárido es de al menos 1:1, tal como de al menos 5:1 o de al menos 10:1.

45 Los glucósidos de alquilo adecuados útiles en la formación del modificador de la reología se representan en la Estructura 1:



50 donde:

$R = C_nH_{2n+1}$ donde $n = 1$ a 30 , tal como $1-10$ (por ejemplo, $-CH_3$, $-C_2H_5$, $-C_3H_7$ o $-C_4H_9$).

Los grupos R adecuados incluyen hidrocarburos lineales y ramificados que se obtienen de forma natural, tal como de fuentes vegetales. Como se apreciará, uno o más de los hidroxilos (pero no todos) de la Estructura 1 se pueden reemplazar por hidrógeno.

Un glucósido ilustrativo es el metilglucósido (MeG), por ejemplo, con una pureza de al menos el 95 % en peso o al menos el 98 % en peso. Dicho material se puede obtener en Lubrizol Corp, Cleveland, Ohio, EE.UU.

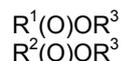
Si bien la Estructura 1 ilustra un monosacárido, también se contemplan polisacáridos de 1 a 10 restos de glucosa de longitud. Los restos de glucosa del polisacárido pueden estar unidos a través de un enlace en 1,4.

COMPONENTE DE ÁCIDO GRASO

Los compuestos lipófilos adecuados para formar el éster del glucósido a través de una reacción de esterificación o transesterificación incluyen compuestos que son reactivos con el glucósido y que tienen un peso molecular suficiente para potenciar el espesamiento asociativo cuando se introducen en un sistema acuoso que contiene tensioactivos. Los compuestos lipófilos ilustrativos incluyen ácidos grasos y ésteres de ácidos grasos que tienen de 6 a 23 átomos de carbono en la cadena de hidrocarburo.

Los ejemplos de ácidos grasos/ésteres adecuados incluyen ácidos/ésteres saturados e insaturados, naturales y sintéticos, que son lineales o ramificados. Los ácidos grasos o sus ésteres se pueden usar solos o como una mezcla. Los ácidos grasos de origen natural ilustrativos incluyen ácidos grasos C_6-C_{22} lineales y ramificados saturados e insaturados. Los ácidos grasos/ésteres lineales adecuados incluyen ácidos grasos y ésteres de ácidos grasos de la forma general mostrada en las Estructuras 2 y 3:

Estructura 2
Estructura 3



donde cada R^1 y R^2 representa un cadena lineal o ramificada de hidrocarburo alifático saturado o insaturado, tal como una cadena de C_6-C_{23} o "cola", o una mezcla de los mismos, donde R^2 tiene menos átomos de carbono en la cadena, como media, que R^1 ; y cada R^3 representa H o un grupo alquilo tal como un grupo alquilo C_1-C_{10} , por ejemplo, metilo, etilo o propilo, butilo, o una mezcla de los mismos. Cuando se hacen reaccionar con el alquilglucósido, estos proporcionan grupos éster o restos de ácidos grasos de forma general $R^1(O)O-$ y $R^2(O)O-$.

Los ejemplos de ácidos y ésteres adecuados, donde el grado de insaturación figura detrás del número de átomos de carbono de la cola, incluyen ácido caproico (ácido hexanoico, $R^1 = C_6: 0$), ácido enántico (ácido heptanoico, $R^1 = C_7: 0$), ácido caprílico (ácido octanoico, $R^1 = C_8: 0$), ácido pelargónico (ácido nonanoico, $R^1 = C_9: 0$), ácido cáprico (ácido decanoico, $R^1 = C_{10}: 0$), ácido undecanoico ($R^1 = C_{11}: 0$), ácido láurico (ácido dodecanoico, $R^1 = C_{12}: 0$), ácido mirístico (ácido tetradecanoico, $R^1 = C_{14}: 0$), ácido palmítico (ácido hexadecanoico, $R^1 = C_{16}: 0$), ácido esteárico (ácido octadecanoico, $R^1 = C_{18}: 0$), ácido isoesteárico (ácido C_7 -meilheptadecanoico, $R^1 = C_{18}: 0$), ácido linoleico (ácido *cis,cis*-9,12-octadecadienoico, $R^1 = C_{18}: 2$), ácido linolénico (uno o ambos de ácido *all-cis*-9,12,15-octadecatrienoico y ácido *all-cis*-6,9,12-octadecatrienoico, $R^1 = C_{18}: 3$), ácido oleico (ácido *cis*-9-octadecenoico, $R^1 = C_{18}: 1$), ácido vaccénico (ácido (*E*)-11-octadecenoico, $R^1 = C_{18}: 1$), ácido eicosanoico ($R^1 = C_{20}: 0$), ácido gadoleico (ácido *cis-icos*-9-enoico, $R^1 = C_{20}: 1$), ácido araquidónico (ácido 5Z,8Z,11Z,14Z)-5,8,11,14-eicosatetraenoico, $R^1 = C_{20}: 4$), ácido eicosapentaenoico (ácido 5Z,8Z,11Z,14Z,17Z)-5,8,11,14,17-icosapentaenoico, $R^1 = C_{20}: 5$), ácido heneicosanoico ($R^1 = C_{21}: 0$), ácido behénico (ácido docosanoico, $R^1 = C_{22}: 0$), ácido erúcico (ácido (*Z*)-docos-13-enoico $R^1 = C_{22}: 1$), ácido lignocérico (ácido tetracosanoico $R^1 = C_{23}: 0$), y ésteres y mezclas de los mismos. Por ejemplo, se pueden usar ésteres de alquilo que tienen de 1 a 8 átomos de carbono tales como un metil-, etil- o propil-éster del ácido graso descrito anteriormente. Estos ácidos son todos no hidroxilados. En algunas realizaciones, se pueden emplear ácidos hidroxilados tales como el ácido ricinoleico (ácido 12-hidroxi-9-*cis*-octadecenoico).

Los ácidos ilustrativos pueden ser de origen vegetal, por ejemplo, obtenidos a partir de aceites vegetales tales como aceites de coco, aceite de palma, aceite de linaza, aceite de soja, aceite de girasol y similares. Los ácidos de origen vegetal disponibles en el mercado pueden contener mezclas de dos o más ácidos.

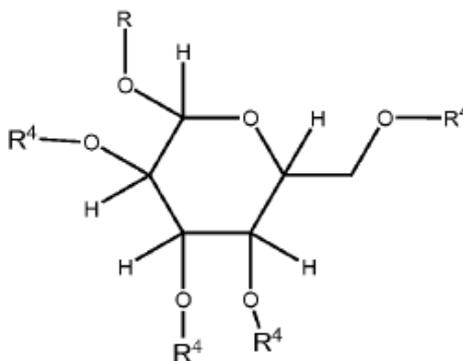
Un ácido graso de cadena larga adecuado es un ácido graso de origen vegetal comercializado como "ácido oleico" y que, en realidad, es una mezcla de ácidos grasos de Estructura 2, donde $R^1 = C_{13}$ a C_{22} , con una longitud media de cadena de átomos de carbono de aproximadamente 16 a 18, y que es predominantemente una mezcla de ácidos oleico, linolénico, linoleico y esteárico. Por consiguiente, cuando se hace referencia en el presente documento al ácido oleico de origen vegetal (o a su éster), significa una mezcla que es predominantemente (más del 60 % en peso o más del 70 % en peso o más del 80 % en peso) ácidos carboxílicos C_{18} insaturados, junto con otros ácidos en cantidades más pequeñas.

Otro ácido graso de cadena larga de origen vegetal, que se comercializa como "ácido mirístico", es, en realidad, una

mezcla de ácidos de Estructura 2, donde $R^1 = C_{13}$ a C_{16} , con una longitud media de la cadena de átomos de carbono de aproximadamente 14, y que es predominantemente $R^1 = C_{14}$.

- 5 Un ácido graso de cadena corta de origen vegetal adecuado (o su éster), que se comercializa como "ácido cáprico/caprílico", es, en realidad, una mezcla de ácidos grasos de Estructura 3, donde $R^3 = C_6$ a C_{10} , y que es predominantemente (más del 60 % en peso o más del 70 % en peso o más del 80 % en peso) $R^3 = C_8 + C_{10}$. Una proporción de $C_8 : C_{10}$ en el ácido/éster cáprico/caprílico de origen vegetal puede ser, por ejemplo, de 1:2 a 3:1, tal como de 1,5:1 a 1:1,1, o de aproximadamente 1,2:1.
- 10 Como se apreciará, cuando es de origen vegetal, el material usado como el ácido graso/éster de cadena larga de origen vegetal puede contener cantidades menores de ácidos grasos/ésteres C_{11} e inferiores de Estructura 3, tales como de hasta el 2 % en peso o de hasta el 1 % en peso o de hasta el 0,1 % en peso. Por lo general, el contenido de ácido graso/éster C_{11} e inferior de la mezcla es predominantemente C_{10} . Además, cuando es de origen vegetal, el material usado como el ácido graso/éster de cadena corta de origen vegetal puede contener cantidades menores de ácidos grasos/éster C_{11} y superiores de Estructura 2, tales como de hasta el 2 % en peso o de hasta el 1 % en peso.
- 15 Por lo general, el contenido de ácidos grasos/éster C_{11} y superiores de la mezcla es predominantemente C_{12} . Sin embargo, para los fines de las proporciones en peso, etc. descritos en el presente documento, R^1 y R^2 solo incluyen los hidrocarburos especificados.
- 20 En la formación de los glucósidos de alquilo esterificados ilustrativos, los glucósidos de alquilo ilustrativos pueden estar mono, di, tri o tetra sustituidos con el ácido/éster. Por ejemplo, los glucósidos de alquilo esterificados pueden tener la fórmula que se muestra en la Estructura 4:

Estructura 4



- 25 donde cada R^4 es independientemente $R^1(O)-$, $R^2(O)-$ o H, y donde R^1 y R^2 son como se han definido anteriormente y al menos uno de R^4 no es H. En los radicales, $R^1(O)-$ y $R^2(O)-$, como se usan en el presente documento y en toda la memoria descriptiva, cada R^1 y R^2 tomados junto con el átomo de oxígeno del carbonilo, (O), representan un grupo acilo. En otras palabras, un átomo de carbono terminal de cada uno de los grupos de hidrocarburo R^1 y R^2 son átomos de carbono de carbonilo.
- 30

Por lo tanto, el componente lipófilo ilustrativo puede ser un hidrocarburo verde o de origen natural, o una fracción de hidrocarburo sustituida que tenga de 6 a 23 átomos de carbono por molécula que se una covalentemente al núcleo de glucósido.

- 35 En la realización ilustrativa, el glucósido esterificado se forma usando una mezcla de ésteres/ácidos, donde la mezcla incluye:

- 40 a) al menos un ácido graso o éster de ácido graso A de Estructura 2, donde R^1 es un hidrocarburo C_{12} o superior ramificado o no ramificado, por ejemplo, un hidrocarburo C_{12} - C_{23} tal como al menos uno de entre ácido láurico, ácido mirístico, ácido palmítico, ácido esteárico, ácido isoesteárico, ácido linoleico, ácido linolénico, ácido oleico y ácido behénico, o éster del mismo.
- 45 b) al menos un ácido graso o éster de ácido graso B de Estructura 3, donde R^2 es un hidrocarburo C_{10} o inferior ramificado o no ramificado, por ejemplo, un hidrocarburo C_6 - C_{10} , tal como al menos uno de entre ácido caproico, enántico ácido, ácido caprílico, ácido pelargónico y ácido cáprico, o éster del mismo.

- En una realización, en el ácido graso o éster de ácido graso de Estructura 2, R^1 incluye un hidrocarburo alifático C_{12} - C_{23} , o una mezcla del mismo. Por ejemplo, el éster de ácido graso usado en la preparación del glucósido esterificado puede ser al menos el 50 % en peso o al menos el 70 % en peso o al menos el 90 % en peso de los compuestos de Estructura 2 y donde R^1 es un hidrocarburo alifático C_{12} - C_{23} o un hidrocarburo C_{13} - C_{21} .
- 50

En una realización, en el ácido graso o éster de ácido graso de Estructura 3, R^2 incluye un hidrocarburo alifático C_6 - C_{10} , o una mezcla del mismo. Por ejemplo, el éster de ácido graso usado en la preparación del glucósido esterificado

puede ser al menos el 50 % en peso o al menos el 70 % en peso o al menos el 90 % en peso de los compuestos de Estructura 3 y donde R² es un hidrocarburo alifático C₆-C₁₀ o es predominantemente (por ejemplo, al menos el 80 % en peso o al menos el 90 % en peso o al menos el 95 % en peso y hasta el 100 % en peso) un hidrocarburo alifático C₈-C₁₀.

5 En una realización, el ácido graso de cadena larga o derivado del mismo y el ácido graso de cadena corta o derivado del mismo difieren en su número medio de átomos de carbono de la cadena de hidrocarburo en al menos 4 o al menos 6, o al menos 8.

10 En general, el modificador de la reología incluye más grupos sustituyentes derivados del ácido graso/éster de cadena corta B que del ácido graso/éster de cadena larga A. Por ejemplo, una proporción molar de ácido graso o éster de ácido graso de cadena larga de Estructura 2: ácido graso o éster de ácido graso de cadena corta de Estructura 3 usada en la preparación del alquilglucósido esterificado (y/o los grupos éster correspondientes del alquilglucósido esterificado formado), puede ser de 0,1:1 a 1:1, tal como de al menos 0,2:1, o de al menos 0,3:1, y
15 puede ser de hasta 0,9:1 o de hasta 0,9:1 o de hasta 0,7:1.

Un grado de esterificación, que es el número medio de grupos R³ (distintos de H) por molécula de alquilglucósido, por ejemplo, los equivalentes molares de los grupos de ácidos grasos con respecto al metilglucósido, puede ser de 0,7:1 a 1,5:1, tal como de hasta 1,3:1, por ejemplo, de 0,8:1 a 1,2:1, o de 0,9:1 a 1,1:1, es decir, de
20 aproximadamente 1:1. En una realización, el grado de esterificación es de al menos 0,9:1.

Al equilibrar el grado de esterificación, así como la proporción de grupos de ácidos grasos de Estructura 2 con respecto a los de la Estructura 3 (proporción de A:B), se obtiene un espesante adecuado para las composiciones tensioactivas, que proporciona una viscosidad inesperadamente alta por mol o unidad de peso del alquilglucósido esterificado.
25

Los ejemplos no limitantes de modificadores de la reología incluyen mezclas de ésteres de glucósido que incluyen:

30 a) un éster de glucósido de cadena larga que incluye al menos un grupo éster seleccionado entre laurato, palmitato de miristilo, estearato, isoestearato, linoleato, linolenato, oleato y behenato, y combinaciones de los mismos; y
b) un éster de glucósido de cadena corta que incluye al menos un grupo éster seleccionado entre hexanoato, enantato, caprilato (octanoato), decanoato, ácido pelargonato y undecanoato, y combinaciones de los mismos.

35 En ejemplos específicos, el éster de glucósido de cadena larga incluye oleato de glucósido o una mezcla de ésteres derivados del ácido oleico (de origen vegetal) natural (ácidos C₁₃-C₂₂).

En ejemplos específicos, el éster de glucósido de cadena larga incluye un grupo alquilato insaturado.

40 En ejemplos específicos, el éster de glucósido de cadena corta incluye octanoato de glucósido de alquilo y decanoato de glucósido de alquilo, tal como octanoato de metilglucósido y decanoato de metilglucósido, que se puede derivar de una mezcla de ácidos cáprico y caprílico, o puede ser al menos uno de ellos.

45 En ejemplos específicos, ninguno de los ésteres de ácidos grasos de metilglucósido que constituye el modificador de la reología está alcoxilado.

Como se apreciará, cuando el modificador de la reología se forma en una sola reacción, donde cada uno de los grupos de ácido graso está presente, el modificador de la reología resultante puede incluir núcleos de glucósido que están cada uno mono-, di-, tri- o tetra-sustituídos con uno cualquiera o más de los grupos de ácidos grasos presentes en la reacción.
50

Se puede considerar que el modificador de la reología resultante consiste en el producto de reacción del/de los glucósido/s seleccionado/s con los ácidos grasos de cadena corta y larga seleccionados y/o éster de los mismos, ignorando cualquier disolvente, así como agua o alcohol producido como subproducto de la reacción (que se puede retirar), pero incluyendo cualquier glucósido y ácido graso o éster sin reaccionar, si los hubiera.
55

A modo de ejemplo, un modificador de la reología ilustrativo es una mezcla de ésteres de metilglucósido de ácidos caprílico/cáprico de origen vegetal y ácido oleico de origen vegetal. Esta mezcla de ésteres de metilglucósido se denomina en el presente documento MeG-CCO. La proporción de los grupos de éster de alquilo insaturados (predominantemente C₁₈) con respecto a otros grupos de éster de alquilo de metilglucósido (predominantemente C₈+ C₁₀ de cadena corta) en el modificador de la reología se denomina en el presente documento la proporción de O/CC. En las proporciones especificadas en el presente documento, la proporción de O/CC es como se determina por RMN. Sin embargo, se apreciará que, en general, corresponde a la proporción de los moles de cada uno de los componentes usados en la formación del modificador de la reología. Más en general, la proporción de O/CC se corresponde estrechamente con la proporción de A:B, donde A representa los moles equivalentes de grupos de éster de alquilo derivados de un ácido o derivado del mismo de acuerdo con la Estructura 2 del modificador de la
60
65

reología y B representa los moles equivalentes de grupos de éster de alquilo derivados de un ácido o derivado del mismo de acuerdo con la Estructura 3 del modificador de la reología. La proporción de O/CC (o A:B) puede estar en el intervalo de 0,1:1 a 0,9:1, o de 0,2:1 a 0,7:1 o de 0,35:1 a 0,6:1, aunque se contemplan otras proporciones. El modificador de la reología se puede formar fácilmente mediante la reacción de transesterificación del metilglucósido con una mezcla de ésteres de cadena de átomos de carbono corta y larga, tales como ésteres de metilo, y ácidos caprílico, cáprico y oleico de origen vegetal.

Otro modificador de la reología ilustrativo es una mezcla de ésteres de metilglucósido de ácidos caprílico, cáprico y láurico. Esta mezcla de ésteres de metilglucósido se denomina en el presente documento MeG-CCL. La proporción de A:B puede estar en el intervalo de 0,35:1 a 0,8:1, tal como al menos 0,5:1, aunque se contemplan otras proporciones.

SÍNTESIS QUÍMICA DE ÉSTERES DE ÁCIDOS GRASOS DE GLICÓSIDOS

Los ésteres de ácidos grasos ilustrativos (por ejemplo, MeG-alquilésteres y alquencilésteres, que pueden denominarse todos en el presente documento MeG-alquilésteres por comodidad) se pueden preparar mediante la reacción de un alquilglucósido con un reactivo de esterificación o de transesterificación lipófilo, tal como un ácido graso o éster del mismo. La reacción puede llevarse a cabo en condiciones tales que se alcance un grado deseado de esterificación. Además, o como alternativa, la proporción de los sustituyentes de esterificación de ácidos grasos:alquilglucósido se puede seleccionar de manera que se optimicen, por ejemplo, se aumenten aproximadamente al máximo, las propiedades viscosificantes y la eficacia del espesante.

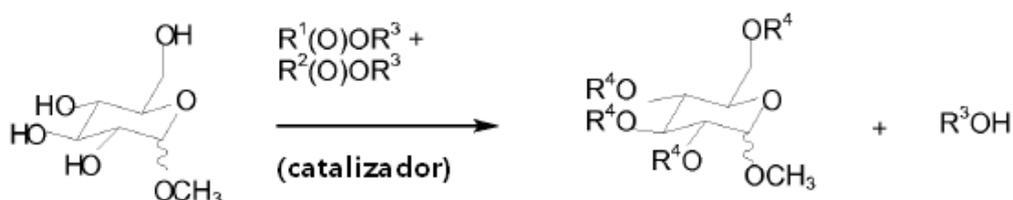
Los ésteres de ácidos grasos del alquilglucósido se pueden sintetizar mediante diversos métodos, incluyendo la síntesis de ésteres usando catalizadores o enzimas convencionales, tales como lipasa, y similares.

El modificador de la reología se puede derivar de una reacción de un alquilglucósido con un ácido graso de cadena larga o derivado del mismo y un ácido graso de cadena corta o derivado del mismo que difieran en su longitud de la cadena de hidrocarburo en, por ejemplo, al menos 4, al menos 6 átomos de carbono, como media.

Los métodos ilustrativos de síntesis incluyen (1) una reacción de intercambio de éster entre los aceites o las grasas de partida y el alquilglucósido; (2) una reacción de intercambio de éster entre un éster de alquilo inferior de un ácido graso y el alquilglucósido; (3) una síntesis de éster entre un ácido graso y alquilglucósido; (4) una síntesis usando un cloruro de ácido graso y un alquilglucósido. Dado que el proceso (4) produce cloruros de acilo, este proceso, en general, no es adecuado para la formación de formulaciones para el cuidado personal.

A modo de ejemplo, los ésteres grasos de metilglucósido se pueden obtener mediante la reacción de metilglucósido (MeG) con agentes de esterificación o transesterificación. Los reactivos de esterificación o transesterificación son ácidos grasos o ésteres de ácidos grasos que se pueden obtener a partir de aceites vegetales. Los reactivos proporcionan un enlace de éster con el poliol de acuerdo con el siguiente esquema de reacción simplificado que se muestra en el Esquema 1:

Esquema 1



donde $\text{R}^4 = \text{R}^1(\text{O})-$, $\text{R}^2(\text{O})-$ o H

La reacción del Esquema 1 anterior muestra la reacción de transesterificación de metilglucósido (MeG) con ésteres de alquilo de ácidos grasos, donde R^1 , R^2 y R^3 son como se han definido anteriormente. Se ha de apreciar que al menos uno de R^4 es $\text{R}^1(\text{O})-$ o $\text{R}^2(\text{O})-$, es decir, al menos un monoéster. Sin embargo, se ha de señalar que, dependiendo de la proporción estequiométrica de los reactivos, se pueden formar varios tipos de mono-, di-, tri- y tetra-ésteres. Además, aunque se muestran dos ésteres de alquilo de ácidos grasos, se pueden usar más de dos en la reacción para generar los poliésteres mixtos con diversos grados de esterificación.

Se pueden proporcionar calor y catalizadores para efectuar la reacción, así como las condiciones adecuadas para eliminar el metanol (en el caso de la transesterificación con un éster) o el agua (en el caso de la esterificación directa con un ácido), que son los subproductos típicos de estas reacciones.

Las reacciones de esterificación y de transesterificación pueden realizarse bajo presión atmosférica o inferior a la atmosférica, por ejemplo, de aproximadamente 0,1 a 150 kPa (de 0,001 a 1,5 atmósferas), por ejemplo, aproximadamente a 100 kPa (aproximadamente 1 atm), y a una temperatura en el intervalo de 110 °C a 180 °C. Los catalizadores se pueden emplear para aumentar la velocidad de reacción. Los catalizadores pueden ser ácidos, básicos o neutros. Los ejemplos de catalizadores para la reacción incluyen metales e hidróxidos alcalinos y sales de los mismos, tales como Na, NaOCH₃, KOCH₃, NaOH, KOH, Na₂CO₃, K₂CO₃; ácidos incluyendo ácido *p*-toluenosulfónico ("p-TSA"), H₂SO₄, HCl, titanatos orgánicos, por ejemplo, titanato de tetraisopropilo. El carbonato de sodio se usa a modo de ejemplo. En algunos casos, no se necesita catalizador para que la reacción tenga lugar a una velocidad aceptable.

Como se apreciará, este esquema de reacción se puede adaptar a cualquiera de los ésteres/ácidos de cadena corta y larga representados en las Estructuras 2 y 3 anteriores.

El método ilustrativo incluye la reacción del glucósido, por ejemplo, el metilglucósido, con una mezcla de ésteres/ácidos de cadena corta y larga. Esto puede realizarse en una sola reacción de síntesis, donde los ésteres/ácidos grasos de cadena corta y larga R¹(O)OR³ y R²(O)OR³ se usan conjuntamente. Como alternativa, se pueden emplear reacciones separadas, donde los ésteres/ácidos grasos de cadena corta y larga se hacen reaccionar por separado con un glucósido, que puede ser el mismo o diferente, y los productos de reacción combinados. En el proceso de síntesis individual, algunos de los núcleos de glucosa se pueden sustituir con sustituyentes de ésteres/ácidos de cadena corta y larga, mientras que en el método de reacción separada, cada núcleo de glucosa se sustituye con sustituyentes de éster/ácido bien de cadena larga o de cadena corta, pero no con ambos.

El modificador de la reología que es el producto de la reacción de esterificación puede estar en forma de una pasta viscosa, translúcida. Aunque el producto de pasta es adecuado para el envasado y la formulación, se puede disolver/dispersar en un disolvente adecuado para proporcionar un espesante líquido fluido, que sea más adecuado para la preparación de composiciones líquidas viscosas que contienen tensioactivos, especialmente a temperatura ambiente. Cualquier líquido capaz de disolver/dispersar los ésteres de glucósido ilustrativos es adecuado para su uso en la formación de una formulación a base de modificador de la reología de baja viscosidad. Los líquidos diluyentes ilustrativos de este tipo incluyen agua, glicoles y otros disolventes, en particular, los de origen vegetal y que se consideran seguros y adecuados para su uso en contacto con los tejidos humanos, tales como la piel y los ojos. Los glicoles de alquileo que tienen de aproximadamente 2 a 5 átomos de carbono por molécula, tales como etilenglicol, 1,2-propanodiol, 1,3-propanodiol, 1,2-butanodiol, 1,3-butanodiol, 1,4-butanodiol y las mezclas de los mismos son glicoles adecuados. Algunos glicoles de origen vegetal, tales como 1,2-propanodiol, se seleccionan cuando se desea un alto contenido de materiales de origen vegetal en la formulación final. Uno de dichos 1,2-propanodiol se obtiene del maíz y se encuentra disponible con el nombre comercial Zemea® de E. I. du Pont de Nemours and Company, Delaware, EE.UU.

Cuando se usa un diluyente, la concentración de diluyente en la formulación a base de modificador de la reología puede ser del al menos 10 % en peso, por ejemplo, en el intervalo del 60 % en peso al 90 % en peso. La viscosidad de la formulación a base de modificador de la reología se puede ajustar de este modo a menos de aproximadamente 10.000 mPa·s, medida con un viscosímetro DV-II+ Pro Brookfield y SPDL SC4-27, que gira a 20 rpm; a 20 °C.

Por ejemplo, la FIGURA 1 muestra la variación de la viscosidad de la solución con la temperatura de una formulación a base de modificador de la reología que incluye MeG-CCO (MeG-éster de caprato, caprilato y "oleato" de origen vegetal como se ha descrito anteriormente) y el 20 % en peso de 1, 2-propanodiol (Zemea®).

COMPOSICIONES ACUOSAS A BASE DE TENSIOACTIVOS

Una composición acuosa a base de tensioactivos ilustrativa incluye al menos un tensioactivo, un modificador de la reología como se ha descrito en el presente documento y agua. La composición puede incluir además un disolvente orgánico. También puede estar presente en la composición una sal hidrosoluble, tal como una sal inorgánica. También pueden estar presentes otros aditivos, como se describe a continuación. En general, la composición es un líquido, aunque también se contemplan los geles y las composiciones sólidas y semisólidas.

El modificador de la reología, como se ha definido anteriormente (excluyendo los diluyentes tales como el agua y/o los glicoles), puede estar presente en la composición acuosa a base de tensioactivos a una concentración del al menos 0,01 % en peso, tal como al menos el 0,1 % en peso o al menos el 0,2 % en peso o al menos el 0,5 % en peso o al menos el 1 % en peso. El modificador de la reología puede estar presente en la composición acuosa a base de tensioactivos a una concentración de hasta el 10 % en peso, tal como hasta el 5 % en peso o hasta el 4 % en peso o hasta el 3 % en peso o hasta el 2 % en peso.

En una realización, la composición acuosa a base de tensioactivos comprende al menos el 40 % en peso de agua (por ejemplo, desionizada, destilada o purificada) o al menos el 60 % en peso de agua, y puede ser de hasta el 80 % en peso o de hasta el 90 % en peso o de hasta el 98 % en peso de agua.

El/los tensioactivo/s puede/n estar presente/s en la composición acuosa a base de tensioactivos a una concentración total del al menos 0,001 % en peso, tal como al menos el 0,01 % en peso o al menos el 1 % en peso, y puede estar presente en hasta el 80 % en peso o más, dependiendo de la aplicación deseada. En un aspecto, el tensioactivo está presente a una concentración total del al menos 2 % en peso o al menos el 5 % en peso o al menos el 6 % en peso o al menos el 8 % en peso. En algunos aspectos, el tensioactivo está presente a una concentración total de hasta el 65 % en peso o hasta el 30 % en peso o hasta el 20 % en peso o hasta el 18 % en peso, basándose en el peso total de la composición acuosa a base de tensioactivo. Todas las concentraciones de tensioactivo en el presente documento se basan en el peso del componente activo del tensioactivo, incluso si se usa en forma diluida.

En una realización, la proporción en peso del modificador de la reología ilustrativo (en concreto, los ésteres de ácidos grasos de alquilglucósido) con respecto al tensioactivo total es inferior a 1:1, tal como de hasta 0,5:1 o de hasta 0,3:1, o de hasta 0,2:1, y en algunas realizaciones, es de al menos 0,01:1, tal como de al menos 0,1:1.

La composición acuosa a base de tensioactivos puede incluir una o más sales inorgánicas, tales como haluros de sodio, potasio y amonio, carboxilatos y citrato, por ejemplo, cloruro de sodio. También se pueden usar las sales orgánicas de bajo peso molecular (<300) tales como el benzoato de sodio. La sal puede estar presente en la composición acuosa a base de tensioactivos a una concentración del al menos 0,01 % en peso, tal como al menos el 0,1 % en peso o al menos el 0,2 % en peso o al menos el 0,5 % en peso, y en algunas realizaciones, puede estar presente en hasta el 3 % en peso, tal como hasta el 2 % en peso, por ejemplo, aproximadamente el 1 % en peso, o menos.

La claridad (turbidez) de una composición a base de tensioactivos se puede determinar en unidades nefelométricas de turbidez (UTN) empleando un medidor de la turbidez nefelométrica (por ejemplo, un Turbidímetro Micro100 o Micro1000, disponible en HF Scientific, Inc.) a temperatura ambiente de aproximadamente 20 a 25 °C. Se supone que las mediciones se realizan a 20 °C mediante el siguiente método, a menos que se indique lo contrario. Se utiliza agua destilada (UTN = 0) como patrón. Se llena viales con tapón a rosca de 25 ml (70 mm x 25 mm) casi hasta arriba con la muestra de ensayo, y se calientan hasta 55 °C durante una hora hasta que se eliminan todas las burbujas. Se limpia cada vial de muestra con un pañuelo de papel para eliminar cualquier mancha antes de colocarlo en un medidor de la turbidez. Se coloca la muestra en el medidor de turbidez y se toma una lectura. Una vez que la lectura se estabiliza, se registra el valor de UTN. Se da al vial un cuarto de vuelta, y se toma otra lectura y se registra. Esto se repite hasta que se tomen las cuatro lecturas. La más baja de las cuatro lecturas se indica como el valor de turbidez. Se consideran turbias las composiciones que tienen un valor de UTN de aproximadamente 60 o superior. Se consideran claras las composiciones que tienen un valor de UTN de menos de aproximadamente 30. Para las muestras que tienen turbidez superior a 100 UTN, se usó el turbidímetro Micro1000. De lo contrario, se usó el turbidímetro Micro100.

Las composiciones acuosas a base de tensioactivos ilustrativas que incluyen el modificador de la reología a modo de ejemplo pueden tener un valor de UTN, determinado mediante este método, de 60 o inferior, por ejemplo, de 50 o inferior, o de 40 o inferior, y en algunas realizaciones, de 30 o inferior o de 20 o inferior, incluso a concentraciones del modificador de la reología hasta el 4 % en peso de la composición.

Los ésteres de alquilglucósido y, en particular, las mezclas de MeG-ésteres que han sido esterificadas con una mezcla de ácidos grasos de cadena de átomos de carbono relativamente larga y corta, como se describe en el presente documento, son capaces de modificar la viscosidad de una variedad de composiciones acuosas a base de tensioactivo, tales como las composiciones de limpieza. Por ejemplo, la viscosidad de las composiciones acuosas a base de tensioactivos ilustrativas formuladas con los modificadores de la reología divulgadas en el presente documento pueden tener una viscosidad de al menos 500 mPa·s (medida con un viscosímetro DV-II+ Pro de Brookfield y el husillo SC421/13R, que gira a 20 rpm; a 20 °C ± 1 °C, de acuerdo con Manual de ingeniería de Brookfield M/98-161-I496). En un aspecto, la viscosidad de la composición acuosa a base de tensioactivos es de al menos 2000 mPa·s o de al menos 3.000 mPa·s o de al menos 10.000 mPa·s o de al menos 15.000 mPa·s o de al menos 20.000 mPa·s o de al menos 25.000 mPa·s mediante este método y, en algunas realizaciones, puede ser de hasta 30.000, 40.000, 50.000 o incluso 60.000 mPa·s o superior. En un aspecto, estas viscosidades se consiguen cuando el propio modificador de la reología está presente a una concentración no superior al 5 % en peso, tal como de hasta el 4 % en peso o hasta el 3 % en peso o hasta el 2 % en peso de la composición acuosa a base de tensioactivo.

Al alcanzar estas viscosidades, el modificador de la reología puede aumentar la viscosidad de la composición acuosa a base de tensioactivos (es decir, sin el modificador de la reología) en al menos el doble, tal como en al menos 10 veces o en al menos 20 veces. Por ejemplo, una composición acuosa a base de tensioactivos puede tener su viscosidad aumentada de menos de 1.000 mPa·s (o menos de 100 mPa·s) hasta al menos 2.000 mPa·s, cuando se añade el modificador de la reología a una concentración no superior al 5 % en peso, tal como hasta el 4 % en peso o hasta el 3 % en peso o hasta el 2 % en peso.

A modo de ejemplo, los ensayos experimentales muestran que cuando el modificador de la reología incluye MeG-ésteres formados de acuerdo con los métodos divulgados en el presente documento, cuando se añaden a una concentración del 0,5 % en peso al 4 % en peso, se eleva la viscosidad de una composición acuosa a base de

tensioactivos de aproximadamente 20 mPa·s a más de 60.000 mPa·s, dependiendo de la composición del tensioactivo. Las formulaciones de limpieza, que deseablemente tienen una viscosidad de entre 3.000 mPa·s y 10.000 mPa·s y una turbidez inferior a 30 UTN, se preparan convenientemente mediante el ajuste de la concentración de los MeG-ésteres, por ejemplo, hasta dentro del intervalo del 0,01 al 2 % en peso para lograr una viscosidad deseada.

En un aspecto, el modificador de la reología puede lograr estas viscosidades a pesar de tener un peso molecular muy bajo. Por ejemplo, el modificador de la reología puede tener un peso molecular medio en número (PMn) inferior a 1.000 daltons o de hasta 500 daltons.

Las composiciones acuosas a base de tensioactivos ilustrativas se pueden preparar a temperatura ambiente (proceso en frío). Por temperatura ambiente, se entiende una temperatura en el intervalo de 15 a 40 °C, tal como inferior a 30 °C. Las composiciones también se pueden formar a temperaturas más altas, tales como de 40 a 70 °C. Sin embargo, existen ventajas en un proceso a temperatura ambiente, siendo una de ellas que no requiere el uso de calor, que ahorra energía y que proporciona un beneficio concomitante con el medio ambiente.

A modo de ejemplo, cuando el modificador de la reología es MeG-CCO (como se ha señalado anteriormente, una mezcla de ésteres de metilglucósido de ácidos caprílico, cáprico y oleico de origen vegetal), y la proporción de O/CC (proporción de los ésteres (oleicos de origen vegetal) de cadena larga con respecto a los ésteres (cápricos/caprílicos) de cadena corta) está en el intervalo de 0,35 a 0,6, se pueden conseguir todas o algunas de las siguientes propiedades:

1. Una viscosidad superior a 2.000 mPa·s, incluso cuando el modificador de la reología se usa a menos del 2,0 % en peso en una composición tensioactiva.
2. Una alta claridad, por ejemplo, turbidez (UTN) inferior a 60 o inferior a 50 o inferior a 30.
3. Estabilidad de la vida útil a largo plazo.
4. Una preparación de procesamiento en frío de la composición tensioactiva.
5. Una formulación que es sinérgicamente compatible con las sales y otros adyuvantes de la formulación.
6. Una formulación tolerante a las sales.
7. Una formulación no alcoxilada.

Dado que el MeG-CCO es de naturaleza no iónica, no se ve afectado negativamente por la presencia de sal en las formulaciones como es el caso de los espesantes poliméricos más cargados. Además, las sales tales como el cloruro de sodio y otras sales, tienden a funcionar sinérgicamente con el MeG-CCO.

Además, el MeG-CCO es un compuesto no alcoxilado (exento de PEG), hidrófobo, no hidrosoluble, que se dispersa fácilmente en agua y en composiciones tensioactivas a temperatura ambiente. A pesar de su falta de solubilidad en el agua, el MeG-CCO es capaz de formar composiciones tensioactivas transparentes en el agua, viscosas, que tienen una turbidez inferior a 30 UTN. Esto es inesperado, ya que la mayoría de los espesantes convencionales para las formulaciones de limpieza son hidrófilos, están cargados o etoxilados, y son muy hidrosolubles.

Además, el MeG-CCO es un compuesto de origen natural no alcoxilado, "verde", renovable que se puede fabricar a partir de una glucosa estabilizada tal como metilglucósido, y diversos ésteres de ácidos grasos de origen vegetal. Como tal, el contenido del modificador de la reología no derivado del petróleo, de origen no animal, puede ser superior al 98 % en peso.

Los MeG-ésteres ilustrativos, cuando se añaden a las composiciones acuosas a base de tensioactivos ilustrativas, pueden proporcionar formulaciones que son suaves y no irritantes para la piel o los ojos. En algunos casos, también son capaces de reducir el efecto de irritación de los tensioactivos primarios. Como tales, los MeG-CCO y otras mezclas de MeG-éster se pueden usar para preparar composiciones de lavado aptas para los sujetos humanos y animales, incluyendo los bebés, cuya piel y cuyos ojos son delicados o sensibles.

Aunque el modificador de la reología ilustrativo puede funcionar como un espesante micelar, también se contemplan otros mecanismos espesantes. Más información acerca de los mecanismos físicos y químicos a través de los cuales los diferentes tipos de espesantes confieren viscosidad a las composiciones acuosas de tensioactivo se describe, por ejemplo, en E. Desmond Goddard; "Principles of Polymer Science and Technology in Cosmetics and Personal Care" (Cosmetic Science and Technology), Publisher: Informa HealthCare; 1ª edición (10 de marzo de 1999); J. E. Glass, "Polymers in Aqueous Media -Performance through Association".

El modificador de la reología ilustrativo se puede incorporar a una composición líquida de limpieza u otra composición a base de tensioactivos vertiendo y mezclando el modificador de la reología en el sistema tensioactivo a temperatura ambiente (proceso en frío) o con calentamiento suave (proceso en caliente), según se desee. El modificador de la reología se puede añadir en cualquier etapa del proceso de mezcla. Esta facilidad de mezcla es una ventaja frente a una serie de espesantes tensioactivos convencionales que requieren neutralización, calentamiento u otras etapas costosas y lentas.

Tensioactivos ilustrativos

Los ejemplos de tensioactivos adecuados para su uso en las composiciones a base de tensioactivos divulgadas en el presente documento incluyen tensioactivos aniónicos, zwitteriónicos (anfóteros), catiónicos y no iónicos, y mezclas de los mismos, y pueden estar presentes del 0,1 % en peso al 40 % en peso de la composición a base de tensioactivo. En una realización, la composición incluye al menos un tensioactivo aniónico. El/los tensioactivo/s aniónico/s puede/n estar presente/s en la composición acuosa a base de tensioactivos a una concentración total de al menos el 0,001 % en peso, tal como al menos 0,1 % en peso, o al menos 1 % en peso, o al menos 5 % en peso. En una realización, el tensioactivo incluye además un tensioactivo zwitteriónico. El/los tensioactivo/s zwitteriónico/s puede/n estar presente/s en la composición acuosa a base de tensioactivos a una concentración total de al menos 0,001 % en peso, tal como al menos 0,1 % en peso, o al menos 1 % en peso, o al menos 5 % en peso.

Tensioactivos aniónicos

Los tensioactivos aniónicos adecuados para su uso en la composición acuosa a base de tensioactivos incluyen sulfatos de alquilo, sulfatos de alquiléter, sulfonatos de alquilo, sulfonatos de alcarilo, α -olefina-sulfonatos, sulfonatos de alquilamida, sulfatos de alcarilpoliéter, sulfatos de alquilamidoéter, sulfatos de alquilmonogliceriléter, sulfatos de alquilmonoglicéridos, sulfonatos de alquilmonoglicéridos, succinatos de alquilo, sulfosuccinatos de alquilo, sulfosuccinatos de alquilo, sulfosuccinatos de alquiléter, amidosulfosuccinatos de alquilo; sulfoacetatos de alquilo, fosfatos de alquilo, fosfatos de alquiléter, carboxilatos de alquiléter, amidoetercarboxilatos de alquilo, ácidos *N*-alquilamino, aminoácidos *N*-acilo, péptidos de alquilo, *N*-acil-auratos, isetionatos de alquilo, sales de carboxilato donde el grupo acilo se obtiene de ácidos grasos ; y las sales de metales alcalinos, metales alcalinotérreos, amonio, amina y trietanolamina de los mismos. Los tensioactivos aniónicos que tienen un alto contenido de masa de origen vegetal son particularmente adecuados e incluyen tensioactivos de origen vegetal con un bajo contenido de tensioactivos derivados del petróleo o alcoxlados

En un aspecto, la fracción catiónica de las sales anteriores se selecciona entre sales de sodio, potasio, magnesio, amonio, mono-, di- y trietanolamina, y sales de mono-, di- y tri-isopropilamina. Los grupos alquilo y acilo de los tensioactivos anteriores pueden contener de 6 a 24 átomos de carbono en un aspecto, de 8 a 22 átomos de carbono en otro aspecto y de 12 a 18 átomos de carbono en un aspecto adicional, y pueden estar insaturados. Los grupos arilo de los tensioactivos se seleccionan entre fenilo o bencilo. Los tensioactivos que contienen éter establecidos anteriormente pueden contener de 1 a 10 unidades de óxido de etileno y/o unidades de óxido de propileno por molécula de tensioactivo en un aspecto, y de 1 a 3 unidades de óxido de etileno por molécula de tensioactivo en otro aspecto.

Los ejemplos de tensioactivos aniónicos adecuados incluyen sales de sodio, potasio, litio, magnesio y amonio de laurethsulfato, tridecethsulfato, myrethsulfato, paréth C₁₂-C₁₃-sulfato , paréth C₁₂-C₁₄-sulfato y paréth C₁₂-C₁₅-sulfato, etoxilados con 1, 2 y 3 moles de óxido de etileno; laurilsulfato de sodio, potasio, litio, magnesio, amonio y trietanolamina, coco-sulfato, tridecilsulfato, miristilsulfato, cetilsulfato, cetearilsulfato, estearilsulfato, oleilsulfato y sulfato de sebo, laurilsulfosuccinato disódico, laurethsulfosuccinato disódico, cocoilisetionato de sodio, sulfonato de olefina C₁₂-C₁₄ de sodio, laureth-6-carboxilato de sodio, metilcocoiltaurato de sodio, cocoilglicinato de sodio, miristilsarcosinato de sodio, dodecibenceno-sulfonato de sodio, cocoilsarcosinato de sodio, cocoilglutamato de sodio, miristoilglutamato de potasio, monolaurilfosfato de trietanolamina y jabones de ácidos grasos, que incluyen las sales de sodio, potasio, amonio y trietanolamina de ácidos grasos saturados e insaturados que contienen de 8 a 22 átomos de carbono.

Tensioactivos catiónicos

Los tensioactivos catiónicos útiles en la formulación a base de tensioactivos ilustrativa pueden incluir cualquiera de los tensioactivos catiónicos conocidos o usados previamente en la técnica de las composiciones acuosas de tensioactivo. Las clases adecuadas de tensioactivos catiónicos incluyen alquilaminas, alquilimidazolininas, aminas etoxiladas, compuestos cuaternarios y ésteres cuaternizados. Los tensioactivos catiónicos particularmente adecuados para la preparación de las composiciones a base de tensioactivos tienen un alto contenido de masa de origen vegetal, como se ha señalado anteriormente.

Los tensioactivos de alquilamina pueden ser sales de alquilaminas C₁₂-C₂₂ de grasas primarias, secundarias y terciarias, sustituidas o no sustituidas, y sustancias a veces denominadas "amidoaminas". Los ejemplos no limitantes de alquilaminas y sus sales incluyen dimetilcocamina, dimetilpalmitamina, dioctilamina, dimetilestearamina, dimetilsojamina, sojamina, miristilamina, tridecilamina, etilestearilamina, *N*-sebopropano-diamina, estearilamina etoxilada, dihidroxietilestearilamina, araquidilbehenilamina, dimetillauramina, clorhidrato de estearilamina, cloruro de sojamina, formiato de estearilamina, dicloruro de *N*-sebopropano-diamina y amodimeticona (nombre INCI para un polímero de silicona y bloqueado con grupos con funcionalidad amino, tales como aminoetilamino-propilsiloxano).

Los ejemplos de amidoaminas y sus sales incluyen estearamidopropil-dimetilamina, citrato de estearamidopropil-dimetilamina, palmitamidopropil-dietilamina y lactato de cocamidopropil-dimetilamina.

Los ejemplos de tensioactivos de alquilimidazolina incluyen alquilhidroxietilimidazolina, tal como estearilhidroxietilimidazolina, cocohidroxietilimidazolina, etilhidroximetiloleiloxazolina, y similares.

5 Los ejemplos de aminas etoxiladas incluyen PEG-cocopoliamina, PEG-15-amina de sebo, quaternium-52, y similares.

Entre los compuestos de amonio cuaternario útiles como tensioactivos catiónicos, algunos corresponden a la fórmula general: $(R^5R^6R^7R^8N^+) E^-$, donde R^5 , R^6 , R^7 y R^8 se seleccionan independientemente de un grupo alifático que tiene de 1 a 22 átomos de carbono, o un grupo aromático, alcoxi, polioxilalquileo, alquilamido, hidroxialquilo, arilo o alquilarilo que tiene de 1 a 22 átomos de carbono de la cadena de alquilo, y E^- es un anión formador de sal tal como los seleccionados entre halógeno (por ejemplo, cloruro, bromuro), acetato, citrato, lactato, glicolato, fosfato, nitrato, sulfato, sulfonato y alquilsulfato. Los grupos alifáticos pueden contener, además de átomos de carbono e hidrógeno, enlaces de éter, enlaces de éster y otros grupos tales como grupos amino. Los grupos alifáticos de cadena más larga, por ejemplo, los de 12 átomos de carbonos o más, pueden estar saturados o insaturados. En un aspecto, los

10

15

Los tensioactivos de amonio cuaternario ilustrativos pueden incluir cloruro de cetiltrimetilamonio, cloruro de cetilpiridinio, cloruro de dicetildimetilamonio, cloruro de dihexadecildimetilamonio, cloruro de dimetilbencilamonio estearílico, cloruro de dioctadecildimetilamonio, cloruro de diecosildimetilamonio, cloruro de didocosildimetilamonio, cloruro de dihexadecildimetilamonio, acetato de dihexadecildimetilamonio, cloruro de beheniltrimetilamonio, cloruro de benzalconio, cloruro de bencetonio y cloruro de di(cocoalquil)dimetilamonio, cloruro de disebodimetilamonio, cloruro de di(sebo hidrogenado)dimetilamonio, acetato de di(sebo hidrogenado)dimetilamonio, metilsulfato de disebodimetilamonio, fosfato de disebodipropilamonio y nitrato de disebodimetilamonio.

20

A pH bajo, los óxidos de amina pueden protonarse y comportarse de manera similar a las *N*-alquilaminas. Los ejemplos incluyen óxido de dimetildodecilamina, óxido de oleildi(2-hidroxietil)amina, óxido de dimetiltetradecilamina, óxido de di(2-hidroxietil)-tetradecilamina, óxido de dimetilhexadecilamina, óxido de behenamina, óxido de cocamina, óxido de deciltetradecilamina, óxido de dihidroxietil C_{12-15} -alcoxipropilamina, óxido de dihidroxietilcocamina, óxido de dihidroxietillauramina, óxido de dihidroxietilstearamina, óxido de dihidroxietilamina de sebo, óxido de amina de núcleo de palma hidrogenado, óxido de amina de sebo hidrogenado, óxido de hidroxietilhidroxipropil $C_{12-C_{15}}$ -alcoxipropilamina, óxido de lauramina, óxido de miristamina, óxido de cetilamina, óxido de oleamidopropilamina, óxido de oleamina, óxido de palmitamina, óxido de PEG-3-lauramina, óxido de dimetillauramina, óxido de trisfosfometilamina de potasio, óxido de sojamidopropilamina, óxido de cocamidopropilamina, óxido de estearamina, óxido de amina de sebo, y mezclas de los mismos.

25

30

35

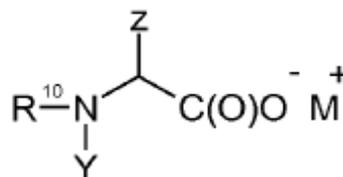
Tensioactivos zwitteriónicos

Los tensioactivos zwitteriónicos (o anfóteros) son moléculas que contienen fracciones ácidas y básicas, y que tienen la capacidad de comportarse bien como un ácido o como una base. Los tensioactivos adecuados pueden ser cualquiera de los tensioactivos anfóteros conocidos o usados anteriormente en la técnica de las composiciones acuosas de tensioactivo. Los ejemplos de clases de tensioactivos anfóteros incluyen aminoácidos (por ejemplo, *N*-alquilaminoácidos y los *N*-acilaminoácidos), betaínas, sultaínas y anfocarboxilatos de alquilo. Los tensioactivos zwitteriónicos particularmente adecuados son los que tienen un alto contenido de masa de origen vegetal, como se ha señalado anteriormente.

40

45

Los tensioactivos a base de aminoácidos adecuados para su uso en la composición a base de tensioactivos ilustrativa incluyen los tensioactivos representados por la fórmula:



donde R^{10} representa un grupo hidrocarburo saturado o insaturado que tiene de 10 a 22 átomos de carbono o un grupo acilo que contiene un grupo hidrocarburo saturado o insaturado que tiene de 9 a 22 átomos de carbono, Y es hidrógeno o metilo, Z se selecciona entre hidrógeno, $-\text{CH}_3$, $-\text{CH}(\text{CH}_3)_2$, $-\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)_2$, $-\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$, $-\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$, $-\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_4\text{OH}$, $-\text{CH}_2\text{OH}$, $-\text{CH}(\text{OH})\text{CH}_3$, $-(\text{CH}_2)_4\text{NH}_2$, $-(\text{CH}_2)_3\text{NHC}(\text{NH})\text{NH}_2$, $-\text{CH}_2\text{C}(\text{O})\text{O}^-\text{M}^+$, $-(\text{CH}_2)_2\text{C}(\text{O})\text{O}^-\text{M}^+$. M es un catión formador de sal. En un aspecto, R^{10} representa un radical seleccionado entre un grupo alquilo C_{10} a C_{22} lineal o ramificado, un grupo alquenilo C_{10} a C_{22} lineal o ramificado, un grupo acilo representado por $R^{11}\text{C}(\text{O})-$, donde R^{11} se selecciona entre un grupo alquilo C_9 a C_{22} lineal o ramificado, un grupo alquenilo C_9 a C_{22} lineal o ramificado. En un aspecto, M^+ se selecciona entre sodio, potasio, amonio y trietanolamina (TEA).

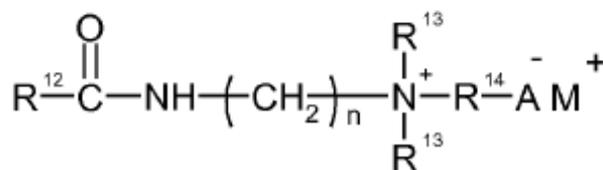
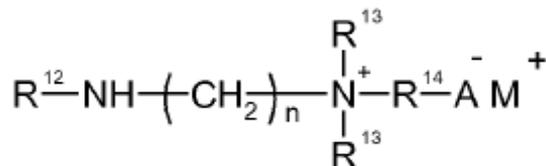
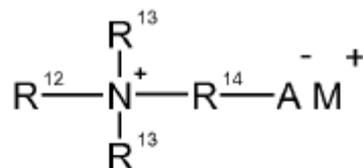
50

55

Los tensioactivos de aminoácidos se pueden obtener de la alquilación y la acilación de α -aminoácidos tales como, por ejemplo, alanina, arginina, ácido aspártico, ácido glutámico, glicina, isoleucina, leucina, lisina, fenilalanina,

serina, tirosina y valina. Los tensioactivos de *N*-acilaminoácidos representativos incluyen las sales de mono- y di-carboxilato (por ejemplo, sodio, potasio, amonio y TEA) de ácido glutámico *N*-acilado, por ejemplo, cocoilglutamato de sodio, lauroilglutamato de sodio, miristoilglutamato de sodio, palmitoilglutamato de sodio, estearoilglutamato de sodio, cocoilglutamato de disodio, estearoilglutamato de disodio, cocoilglutamato de potasio, lauroilglutamato de potasio y miristoilglutamato de potasio; las sales de carboxilato (por ejemplo, sodio, potasio, amonio y TEA) de alanina *N*-acilada, por ejemplo, cocoilalaninato de sodio y lauroilalaninato de TEA; las sales de carboxilato (por ejemplo, sodio, potasio, amonio y TEA) de glicina *N*-acilada, por ejemplo, cocoilglicinato de sodio y cocoilglicinato de potasio; las sales de carboxilato (por ejemplo, sodio, potasio, amonio y TEA) de sarcosina *N*-acilada, por ejemplo, lauroilsarcosinato de sodio, cocoilsarcosinato de sodio, miristoilsarcosinato de sodio, oleoilsarcosinato de sodio y lauroilsarcosinato de amonio; y mezclas de los tensioactivos anteriores.

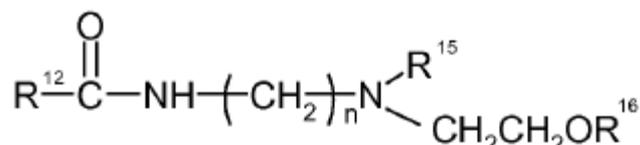
Las betaínas y las sultaínas útiles en el presente documento se pueden seleccionar entre alquilbetaínas, alquilaminobetaínas y alquilamidobetaínas, así como las correspondientes sulfobetainas (sultaínas) representadas por las fórmulas:



donde R^{12} es un grupo alquilo o alquenilo C_7-C_{22} , cada R^{13} es independientemente un grupo alquilo C_1-C_4 , R^{14} es un grupo alquilenilo C_1-C_5 o un grupo alquilenilo C_1-C_5 sustituido con hidroxilo, n es un número entero de 2 a 6, A es un grupo carboxilato o sulfonato, y M es un catión formador de sal. En un aspecto, R^{12} es un grupo alquilo $C_{11}-C_{18}$ o un grupo alquenilo $C_{11}-C_{18}$. En un aspecto, R^{13} es metilo. En un aspecto, R^{14} es metileno, etileno o hidroxipropileno. En un aspecto, n es 3. En un aspecto adicional, M se selecciona entre cationes de sodio, potasio, magnesio, amonio y mono-, di- y trietanolamina.

Los ejemplos de betaínas adecuadas pueden incluir laurilbetaína, cocamidopropilbetaína, cocobetaína, oleamidopropilbetaína, oleilbetaína, cocohexadecil dimetilbetaína, laurilamidopropilbetaína y cocamidopropilhidroxisultaína.

Los alquilanfocarboxilatos tales como los alquilanfocetatos y los alquilanfopropionatos (carboxilatos mono- y disustituidos) se pueden representar por la fórmula:



donde R^{12} es un grupo alquilo o alquenilo C_7-C_{22} , R^{15} es $-CH_2C(O)O^- M^+$, $-CH_2CH_2C(O)O^- M^+$ o $-CH_2CH(OH)CH_2SO_3^- M^+$, R^{16} es un hidrógeno o $-CH_2C(O)O^- M^+$, y M es un catión seleccionado entre sodio, potasio, magnesio, amonio y mono-, di- y trietanolamina.

Los alquilanfocarboxilatos ilustrativos pueden incluir cocoanfocetato sódico, lauroanfocetato sódico, capriolfocetato sódico, cocoanfodiacetato disódico, lauroanfodiacetato disódico, capriolfodiacetato disódico, cocoanfodipropionato disódico, lauroanfodipropionato disódico, capriolfodipropionato disódico y capriolfodipropionato disódico.

Tensioactivos no iónicos

El tensioactivo no iónico puede ser cualquiera de los tensioactivos no iónicos conocidos o usados previamente en la técnica de las composiciones acuosas de tensioactivo. Los tensioactivos no iónicos particularmente adecuados son los que tienen un alto contenido de masa de origen vegetal, como se ha señalado anteriormente. Los tensioactivos no iónicos adecuados pueden incluir ácidos de cadena lineal o ramificada primarios o secundarios (C₆-C₁₈) alifáticos, alcoholes o fenoles; etoxilatos de alquilo; alcoxilatos de alquilfenol (especialmente etoxilatos y fracciones etoxi/propoxi mixtas); condensados de bloques de óxido de alquileno de alquilfenoles; condensados de óxido de alquileno de alcanoles; y copolímeros de bloques de óxido de etileno/óxido de propileno. Otros tensioactivos no iónicos adecuados incluyen mono- o dialquil-alcanolamidas; poliglucósidos de alquilo (APG); ésteres de ácidos grasos de sorbitán; ésteres de ácidos grasos de sorbitán de polioxietileno; ésteres de sorbitol de polioxietileno; ácidos de polioxietileno y alcoholes polioxietilénicos. Otros ejemplos de tensioactivos no iónicos adecuados incluyen coco-mono- o dietanolamida, coco-glucósido, decildiglicósido, diglicósido de laurilo, coco-diglicósido, polisorbato 20, 40, 60 y 80, alcoholes lineales etoxilados, alcohol cetearílico, alcohol de lanolina, ácido esteárico, estearato de glicerilo, PEG-100 estearato, laureth 7 y oleth 20.

En otra realización, los tensioactivos no iónicos pueden incluir metilglucósidos alcoxilados tales como, por ejemplo, metilgluceth-10, metilgluceth-20, éter de PPG-10-metilglucosa y éter de PPG-20-metilglucosa, disponibles en Lubrizol Advanced Materials, Inc., con los nombres comerciales, Glucam® E10, Glucam® E20, Glucam® P10 y Glucam® P20, respectivamente; y también son adecuados los metilglucósidos alcoxilados modificados hidrófobamente tales como dioleato de PEG 120-metilglucosa, trioleato de PEG-120-metilglucosa y sesquiestearato de PEG-20-metilglucosa, disponibles en Lubrizol Advanced Materials, Inc., con los nombres comerciales, Glucamate® DOE-120, Glucamate™ LT y Glucamate™ SSE-20, respectivamente. Otros metilglucósidos alcoxilados modificados hidrófobamente ilustrativos se divulgan en las patentes de EE.UU. n.º 6.573.375 y 6.727.357.

Otros tensioactivos que se pueden utilizar en el presente documento se exponen en más detalle en el documento WO 99/21530, la patente de EE.UU. n.º 3.929.678, la patente de EE.UU. n.º 4.565.647, la patente de EE.UU. n.º 5.720.964 y la patente de EE.UU. n.º 5.858.948. Además, también se describen tensioactivos adecuados en "McCutcheon's Emulsifiers and Detergents" (North American and International Editions, de Schwartz, Perry y Berch).

En una realización, la composición está exenta de tensioactivos alcoxilados. En otra realización, la composición está exenta de tensioactivos a base de sulfato. Por exenta, se entiende que la composición incluye no más del 0,001 % de tensioactivos de este tipo.

En un aspecto, el tensioactivo anfótero se selecciona entre una alquilbetaína, una alquilaminobetaína, una alquilamidobetaína y mezclas de las mismas. Las betaínas representativas incluyen laurilbetaína, lauramidopropilbetaína, coco-betaína, coco-amidopropilbetaína, coco-amidopropilhidroxi-sultaína, lauroanfoacetato de sodio, cocoanfoacetato de sodio, cocoanfodiacetato de mono- y di-sodio, lauroanfodiacetato de mono- y di-sodio, cocoanfopropionato de sodio, cocoanfodihidroxipropilsulfonato de sodio y mezclas de los mismos.

En un aspecto, el tensioactivo aniónico se selecciona entre laurilsulfato de sodio o de amonio, cocoanfoacetato de sodio (SCAA), lauril-sulfosuccinato disódico (DSLSS), laureth-sulfosuccinato disódico, cocoil-isetionato de sodio o de amonio, lauroil-lactilato de sodio, cocoil-glutamato de sodio, cocoil-glutamato, lauroil-glutamato, capriloil-glutamato, lauroil-sarcosinato de sodio, y combinaciones de los mismos.

Otros aditivos

La composición acuosa a base de tensioactivos puede incluir opcionalmente uno o más aditivos, tales como una o más sales inorgánicas (como se ha señalado anteriormente), siliconas, emolientes, emulsionantes, agentes nacarados, agentes colorantes, partículas, conservantes, agentes de ajuste del pH, productos botánicos, agentes quelantes, agentes antimicrobianos y similares. Además, se pueden usar modificadores de la reología distintos del modificador de la reología ilustrativo, que pueden servir como polímeros en suspensión.

Agentes de ajuste del pH

Las composiciones acuosas a base de tensioactivos ilustrativas se pueden formular en intervalos de pH 0,5 a 12. El pH deseado para la composición puede depender de las aplicaciones específicas de los productos finales. En general, las aplicaciones para el cuidado personal tienen un intervalo de pH deseado de 3 a 10, en un aspecto, y de 3,5 a 7,5, en otro aspecto.

El pH de las composiciones ilustrativas se puede ajustar con cualquier combinación de agentes de ajuste del pH ácidos y/o básicos.

Los ejemplos de bases inorgánicas que pueden usarse para aumentar el pH incluyen hidróxidos de metales alcalinos (especialmente sodio, potasio) e hidróxido de amonio, y sales de metales alcalinos de ácidos inorgánicos, tales como borato de sodio (bórax), fosfato de sodio, pirofosfato de sodio y similares, y mezclas de los mismos. Son

ejemplos de bases orgánicas que se pueden usar para aumentar el pH la trietanolamina (TEA), diisopropanolamina, triisopropanolamina, aminometilpropanol, dodecilamina, cocamina, oleamina, morfolina, triamilamina, trietilamina, tetraquis(hidroxipropil)etilendiamina, L-arginina, aminometilpropanol, trometamina (2-amino-2-hidroximetil-1,3-propanodiol) y PEG-15-cocamina. Como alternativa, se pueden usar otros materiales alcalinos solos o en combinación con las bases inorgánicas y orgánicas anteriormente mencionadas. Los materiales ácidos adecuados para reducir el pH incluyen ácidos orgánicos y ácidos inorgánicos, por ejemplo, ácido acético, ácido cítrico, ácido tartárico, ácidos alfa-hidroxiácidos, beta-hidroxiácidos, ácido salicílico, ácido láctico, ácido glicólico y los ácidos de frutas naturales, o ácidos inorgánicos, por ejemplo, ácido clorhídrico, ácido nítrico, ácido sulfúrico, ácido sulfámico, ácido fosfórico, y combinaciones de los mismos.

Se puede emplear una combinación de agentes de ajuste del pH ácidos y básicos.

Los agentes tampón se pueden usar en las composiciones ilustrativas. Los agentes tampón adecuados incluyen carbonatos de metales alcalinos o de metales alcalinotérreos, fosfatos, bicarbonatos, citratos, boratos, acetatos, anhídridos de ácido, succinatos, y similares, tales como fosfato de sodio, citrato de sodio, acetato de sodio, bicarbonato de sodio y carbonato de sodio.

El agente de ajuste del pH y/o agente tampón se utiliza en cualquier cantidad adecuada para obtener y/o mantener un valor de pH deseado en la composición.

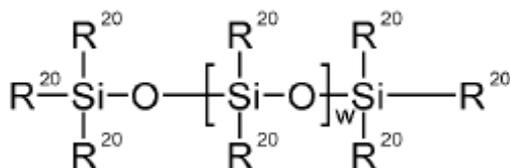
Siliconas

En un aspecto, las siliconas se utilizan como agentes de acondicionamiento que se usan comúnmente en productos acondicionadores del cabello que se eliminan con aclarado y en champús tales como los denominados champús acondicionadores “dos en uno”. En un aspecto, el agente acondicionador es un agente acondicionador de silicona insoluble. Por lo general, el agente acondicionador se mezclará en la composición del champú para formar una fase separada, discontinua de partículas dispersas, insolubles (también denominadas gotitas). La fase de agente acondicionador capilar de silicona puede ser un fluido de silicona y también puede incluir otros ingredientes tales como una resina de silicona, para mejorar la eficacia de la deposición del fluido de silicona o para mejorar el brillo del cabello, especialmente cuando se usan agentes acondicionadores de silicona de alto índice de refracción (por ejemplo, superior a aproximadamente 1,6). La fase de agente acondicionador capilar de silicona opcional puede incluir silicona volátil, silicona no volátil o combinaciones de las mismas. Las partículas de agente acondicionador de silicona pueden comprender silicona volátil, silicona no volátil, o combinaciones de las mismas. En un aspecto, se utilizan agentes acondicionadores de silicona no volátiles. Si hay siliconas volátiles presentes, normalmente serán incidentales a su uso como disolvente o vehículo para formas disponibles en el mercado de ingredientes de materiales de silicona no volátiles, tales como gomas y resinas de silicona. Los agentes acondicionadores del cabello de silicona para su uso en las composiciones a base de tensioactivos ilustrativas divulgadas en el presente documento tienen una viscosidad de aproximadamente 5×10^{-7} a aproximadamente $50 \text{ m}^2/\text{s}$ (de aproximadamente 0,5 a aproximadamente 50.000.000 cSt), en un aspecto, de aproximadamente 0,00001 a aproximadamente $30 \text{ m}^2/\text{s}$ (de aproximadamente 10 a aproximadamente 30.000.000 cSt) en otro aspecto, de aproximadamente 0,0001 a aproximadamente $2 \text{ m}^2/\text{s}$ (de aproximadamente 100 a aproximadamente 2.000.000 cSt) en un aspecto adicional, y de aproximadamente 0,001 a aproximadamente $1,5 \text{ m}^2/\text{s}$ (de aproximadamente 1.000 a aproximadamente 1.500.000 cSt) en un aspecto adicional más, medida a 25 °C.

En una realización, las partículas de agente acondicionador de silicona pueden tener un diámetro medio de partícula en volumen que varía de aproximadamente $0,01 \mu\text{m}$ a aproximadamente $500 \mu\text{m}$. Para la aplicación de partículas pequeñas en el cabello, los diámetros medios de partícula en volumen pueden variar de aproximadamente $0,01 \mu\text{m}$ a aproximadamente $4 \mu\text{m}$ en un aspecto, de aproximadamente $0,01 \mu\text{m}$ a aproximadamente $2 \mu\text{m}$ en otro aspecto, y de aproximadamente $0,01 \mu\text{m}$ a aproximadamente $0,5 \mu\text{m}$ en todavía otro aspecto. Para la aplicación de partículas más grandes en el cabello, los diámetros medios de partícula en volumen normalmente varían de aproximadamente $5 \mu\text{m}$ a aproximadamente $125 \mu\text{m}$ en un aspecto, de aproximadamente $10 \mu\text{m}$ a aproximadamente $90 \mu\text{m}$ en otro aspecto, de aproximadamente $15 \mu\text{m}$ a aproximadamente $70 \mu\text{m}$ en otro aspecto más y de aproximadamente $20 \mu\text{m}$ a aproximadamente $50 \mu\text{m}$ en un aspecto adicional.

Los antecedentes sobre las siliconas, incluyendo los apartados que tratan sobre fluidos, gomas y resinas de silicona, así como la fabricación de siliconas, se encuentra en la “Encyclopedia of Polymer Science and Engineering”, vol. 15, 2ª ed., pág. 204-308, John Wiley & Sons, Inc. (1989). En general, los fluidos de silicona se describen como polímeros de alquilsiloxano. Los ejemplos no limitantes de agentes acondicionadores de silicona adecuados, y de agentes de suspensión opcionales para la silicona, se describen en la patente de EE.UU. reexpedida n.º 34.584, y las patentes de EE.UU. n.º 5.104.646; 5.106.609.

Los aceites de silicona incluyen polialquilsiloxanos, poliarilsiloxanos o polialquilarilsiloxanos que se ajustan a la siguiente fórmula:



donde R²⁰ es un grupo alifático, seleccionado independientemente entre alquilo, alqueno y arilo, R²⁰ puede estar sustituido o no sustituido, y w es un número entero de 1 a aproximadamente 8.000. Los grupos R²⁰ no sustituidos adecuados incluyen, pero sin limitación, alcoxi, ariloxi, alcarilo, arilalquilo, arilalqueno, alcamino, y grupos alifáticos y arilo sustituidos con éter, sustituidos con hidroxilo sustituidos con halógeno. Los grupos R²⁰ adecuados también incluyen aminas, aminas catiónicas y grupos de amonio cuaternario.

En un aspecto, los sustituyentes alquilo y alqueno R²⁰ ilustrativos incluyen grupos alquilo C₁-C₅ y grupos alqueno C₁-C₅. En otro aspecto, R²⁰ es metilo. Las partes alifáticas de otros grupos que contienen alquilo y alqueno (tales como alcoxi, alcarilo y alquilamino) pueden ser cadenas lineales o ramificadas, y contienen de C₁ a C₅ en un aspecto, de C₁ a C₄ en otro aspecto, y de C₁ a C₂ en un aspecto adicional. Como se ha descrito anteriormente, los sustituyentes R²⁰ también pueden contener funcionalidades amino (por ejemplo, grupos alcamino), que pueden ser aminas primarias, secundarias o terciarias o amonio cuaternario. Estos incluyen grupos mono-, di- y tri-alquilamino y alcóxiamino, donde la longitud de la cadena de la parte alifática es como se ha descrito anteriormente. Los grupos arilo ilustrativos en las realizaciones anteriores incluyen fenilo y bencilo.

Son siloxanos ilustrativos el polidimetilsiloxano, polidietilsiloxano y polimetilfenilsiloxano. Estos siloxanos están disponibles, por ejemplo, en Momentive Performance Materials en su serie Viscasil R y SF 96, y en Dow Corning comercializados como la serie Dow Corning 200. Los fluidos de polialquilarilsiloxanos ilustrativos que se pueden usar incluyen, por ejemplo, polimetilfenilsiloxanos. Estos siloxanos están disponibles, por ejemplo, en Momentive Materials Performance como líquido de metilfenilo SF 1075, en Dow Corning como 556 Cosmetic Grade Fluid, o en Wacker Chemical Corporation, Adrian, MI, con el nombre comercial serie Wacker-Belsil® PDM de siliconas modificadas con fenilo (por ejemplo, PDM 20, PDM 350 y PDM 1000).

Los fluidos de silicona catiónicos también son adecuados para su uso con las composiciones ilustrativas. Los fluidos de silicona catiónicos ilustrativos pueden estar representados por la fórmula general:

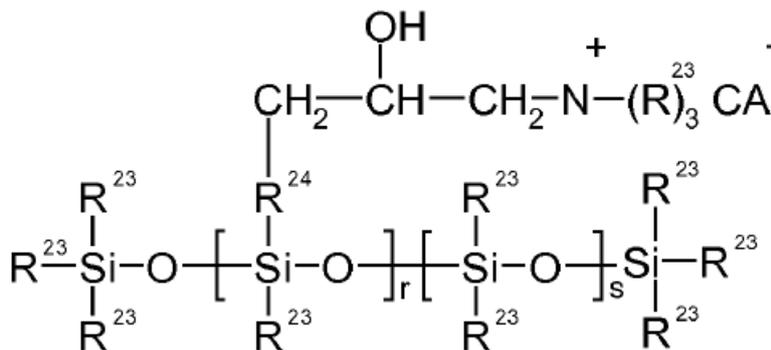


donde G es hidrógeno, fenilo, hidroxilo o alquilo C₁-C₈ (por ejemplo, metilo o fenilo); e es 0 o un número entero que tiene de 1 a 3; f es 0 o 1; g es un número de 0 a 1.999; h es un número entero de 1 a 2.000, en un aspecto, y de 1 a 10, en otro aspecto; la suma de g y h es un número de 1 a 2.000 en un aspecto, y de 50 a 500, en otro aspecto; R²¹ es un radical monovalente correspondiente a la fórmula general C_qH_{2q}L, donde q es un número entero que tiene un valor de 2 a 8, y L se selecciona de los siguientes grupos:

- a) -N(R²²)CH₂CH₂N(R²²)₂
- b) -N(R²²)₂
- c) -N⁺(R²²)₃ CA⁻
- d) -N(R²²)CH₂CH₂N⁺H₂R²² CA⁻

donde R²² se selecciona independientemente entre hidrógeno, alquilo C₁-C₂₀, fenilo, bencilo; y CA⁻ es un contraión haluro seleccionado entre cloruro, bromuro, fluoruro y yoduro.

En otro aspecto, una silicona catiónica útil en las composiciones a base de tensioactivos se puede representar por la fórmula:

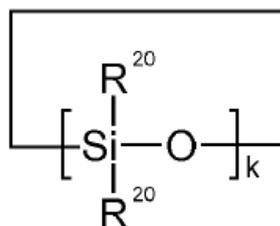


donde R^{23} representa un radical seleccionado entre un grupo alquilo C_1-C_{18} y un grupo alqueno C_1-C_{18} ; R^{24} representa independientemente un radical seleccionado entre un radical alqueno C_1-C_{18} o un radical alqueno C_1-C_{18} ; CA es un ión haluro; r representa un número entero que varía de 2 a 20 en un aspecto, y de 2 a 8 en otro aspecto; s representa un número entero que varía de 20 a 200 en un aspecto, y de 20 a 50, en otro aspecto. En un aspecto, R^{23} es metilo. En otro aspecto, Q es un ión cloruro. Un ejemplo de un polímero de silicona cuaternario útil en el presente documento es Abil® T Quat 60, disponible en Evonik Goldschmidt Corporation, Hopewell, VA.

Otra clase de fluidos de silicona adecuados son las gomas de silicona insolubles. Estas gomas son materiales de polisiloxano que tienen una viscosidad a 25 °C superior o igual a 1 m²/s (1.000.000 cSt). Las gomas de silicona se describen en la patente de EE.UU. n.º 4.152.416; Noll y Walter, Chemistry and Technology of Silicones, Nueva York: Academic Press 1968; y en General Electric Silicone Rubber Product Data Sheets SE 30, SE 33, SE 54 y SE 76. Las gomas de silicona normalmente tienen un peso molecular en masa en un exceso de aproximadamente 200.000 daltons, por lo general, de aproximadamente 200.000 a aproximadamente 1.000.000 daltons, cuyos ejemplos específicos incluyen polidimetilsiloxano, copolímero de polidimetilsiloxano/metilvinilsiloxano, copolímero de polidimetilsiloxano/difenilsiloxano/metilvinilsiloxano, y mezclas de los mismos.

Otra categoría de agentes acondicionadores de fluidos de silicona insolubles, no volátiles, incluyen polisiloxanos de alto índice de refracción, que tienen un índice de refracción de al menos aproximadamente 1,46 en un aspecto, al menos aproximadamente 1,48 en otro aspecto, al menos aproximadamente 1,52 en un aspecto adicional, y al menos aproximadamente 1,55 en un aspecto adicional más. El índice de refracción del fluido de polisiloxano será generalmente inferior a de aproximadamente 1,70, normalmente inferior a aproximadamente 1,60. En este contexto, el "fluido" de polisiloxano incluye aceites, resinas y gomas.

El fluido de polisiloxano de alto índice de refracción incluye los representados por la fórmula general expuesta para los polialquilsiloxanos, poliarilsiloxanos y polialquilarilsiloxanos descritos anteriormente, así como los polisiloxanos cíclicos (ciclometiconas) representados por la fórmula:



donde el sustituyente R^{20} es como se ha definido anteriormente, y el número de unidades de repetición, k, varía de aproximadamente 3 a aproximadamente 7, en un aspecto, y de 3 a 5 en otro aspecto. Los fluidos de polisiloxano de alto índice de refracción pueden contener una cantidad de arilo que contiene sustituyentes R^{20} suficientes para aumentar el índice de refracción hasta el nivel deseado, que se ha descrito anteriormente. Además, R^{20} y k se deben seleccionar de manera que el material sea no volátil. Los sustituyentes que contienen arilo incluyen los que contienen anillos arilo de cinco y seis miembros alicíclicos y heterocíclicos, y los que contienen anillos de cinco o seis miembros condensados. Los anillos de arilo pueden estar sustituidos o no sustituidos. Los sustituyentes incluyen sustituyentes alifáticos, y también pueden incluir sustituyentes alcoxi, sustituyentes acilo, cetonas, halógenos (por ejemplo, Cl y Br), aminas, etc. Los grupos que contienen arilo ilustrativos incluyen arenos sustituidos y no sustituidos, tales como fenilo, y derivados de fenilo tales como fenilos con sustituyentes alquilo o alqueno C_1-C_5 , por ejemplo, alilfenilo, metilfenilo y etilfenilo, vinilfenilos tales como estirenilo y fenilalquinos (por ejemplo, fenilalquinos C_1-C_4). Los grupos arilo heterocíclicos incluyen sustituyentes derivados de furano, imidazol, pirrol, piridina, etc. Los sustituyentes de anillo arilo condensado incluyen, por ejemplo, naftaleno, cumarina y purina.

Los fluidos de polisiloxano de alto índice de refracción pueden tener un grado de sustituyentes que contienen arilo del al menos aproximadamente 15 % en peso en un aspecto, al menos aproximadamente el 20 % en peso en otro aspecto, al menos aproximadamente el 25 % en peso en un aspecto adicional, al menos aproximadamente el 35 % en peso en otro aspecto adicional más, y al menos el aproximadamente 50 % en peso en un aspecto adicional, basándose en el peso del fluido de polisiloxano. Por lo general, el grado de sustitución de arilo será inferior al aproximadamente 90 % en peso, más normalmente inferior al aproximadamente 85 % en peso, y generalmente, puede variar del aproximadamente 55 % al aproximadamente 80 % en peso del fluido de polisiloxano.

En otro aspecto, los fluidos de polisiloxano de alto índice de refracción tienen una combinación de fenilo o derivados de fenilo sustituidos. Los sustituyentes se pueden seleccionar entre alquilo C_1-C_4 (por ejemplo, metilo), hidroxilo y alquilamino C_1-C_4 .

Cuando se usan siliconas de alto índice de refracción (resinas de silicona, ceras de silicona y siliconas modificadas con fenilo) en las composiciones a base de tensioactivos ilustrativas, se pueden usar opcionalmente en solución con un agente de difusión, tal como una resina de silicona o un tensioactivo adecuado, para reducir la tensión superficial en una cantidad suficiente para mejorar la difusión y, por lo tanto, aumentar el brillo (después del secado) del cabello

tratado con dichas composiciones. Los fluidos de silicona adecuados para su uso en las composiciones a base de tensioactivos ilustrativas se divulgan en las patentes de EE.UU. n.º 2.826.551; 3.964.500; 4.364.837 y la patente británica n.º 849.433. Hay polisiloxanos y poliariilsiloxanos de alto índice de refracción (trimetilpentafeniltrisiloxano, disponible con el nombre comercial DC PH-1555 HRI) disponibles en Dow Corning Corporation (Midland, MI), Huls America (Piscataway, N.J.) y Momentive Performance Materials Inc. (Albany, N.Y.). Los ejemplos de ceras de silicona incluyen SF 1632 (Nombre INCI: Ceteril meticona) y SF1642 (Nombre INCI: alquil dimeticona C₃₀₋₄₅), también disponible en Momentive Performance Materials, Inc.

Se pueden incluir resinas de silicona y geles de resina como un agente acondicionador de silicona adecuado para su uso en las composiciones a base de tensioactivos ilustrativas. Estas resinas son polisiloxanos reticulados. La reticulación se introduce a través de la incorporación de silanos trifuncionales y tetrafuncionales con silanos monofuncionales y/o difuncionales durante la fabricación de la resina de silicona.

Como es bien sabido en la técnica, el grado de reticulación que se requiere para dar lugar a una resina de silicona variará de acuerdo con las unidades de silano específicas incorporadas en la resina de silicona. En general, se consideran resinas de silicona los materiales de silicona que tienen un nivel suficiente de unidades monoméricas de siloxano trifuncional y tetrafuncional (y por tanto, un nivel suficiente de reticulación) de modo que forman una película rígida o dura. La proporción de átomos de oxígeno con respecto a los átomos de silicio indica el nivel de reticulación de un determinado material de silicona. Los materiales de silicona, que tienen al menos aproximadamente 1,1 átomos de oxígeno por átomo de silicio, en general, serán resinas de silicona en el presente documento. En un aspecto, la proporción de átomos de oxígeno:silicio es de al menos aproximadamente 1,2:1,0. Los silanos usados en la fabricación de resinas de silicona incluyen monometil-, dimetil-, trimetil-, monofenil-, difenil-, metilfenil-, monovinil- y metilvinil-clorosilanos, y teraclorosilano, siendo los silanos sustituidos con metilo los utilizados más comúnmente. En un aspecto, las resinas de silicona adecuadas son SS4230 (Nombre INCI: Ciclopetasiloxano (y) Trimetilsiloxisilicato) y SS4267 (Nombre INCI: Dimeticona (y) Trimetilsiloxisilicato) disponibles en Momentive Performance Materials, Inc. Los geles de resina de silicona adecuados incluyen RG100 (Nombre INCI: Ciclopetasiloxano (y) polímero reticulado de dimeticona/viniltrimetilsiloxisilicato) de Wacker Chemical Corporation.

Los materiales de silicona y las resinas de silicona se pueden identificar de acuerdo con un sistema de nomenclatura abreviada conocido como la nomenclatura "MDTQ". Según este sistema de nomenclatura, la silicona se describe de acuerdo con la presencia de diversas unidades monoméricas de siloxano que forman la silicona. En resumen, el símbolo M indica la unidad monofuncional (CH₃)₃SiO_{0,5}; D indica la unidad difuncional (CH₃)₃SiO; T indica la unidad trifuncional (CH₃)₃SiO_{1,5}; y Q indica la unidad cuada- o tetra-funcional SiO₂. Los apóstrofes de los símbolos unitarios (por ejemplo, M', D', T' y Q') indican sustituyentes distintos de metilo, y se definen específicamente para cada aparición. Los sustituyentes alternativos típicos incluyen grupos tales como vinilo, fenilos, aminas, hidroxilos, etc. Las proporciones molares de las diversas unidades, ya sea en términos de subíndices del símbolo que indican el número total de cada tipo de unidad en la silicona (o una media de los mismos) o como proporciones específicamente indicadas en combinación con el peso molecular completan la descripción del material de silicona según el sistema MDTQ. Las cantidades molares relativas mayores de T, Q, T' y/o Q' con respecto a D, D', M y/o M' en una resina de silicona son indicativas de los niveles superiores de reticulación. Como se ha descrito anteriormente, sin embargo, el nivel global de reticulación también puede indicarse por la proporción del oxígeno con respecto al silicio.

Las resinas de silicona ilustrativas para su uso en las composiciones de las composiciones a base de tensioactivos ilustrativas incluyen, pero sin limitación, resinas MQ, MT, MTQ, MDT y MDTQ. En un aspecto, el metilo es el sustituyente de resina de silicona. En otro aspecto, la resina de silicona se selecciona entre una resina MQ, donde la proporción de M:Q es de aproximadamente 0,5:1,0 a aproximadamente 1,5:1,0, y el peso molecular medio de la resina de silicona es de aproximadamente 1.000 a aproximadamente 10.000 daltons.

Cuando se emplea con fluidos de silicona no volátiles que tienen un índice de refracción por debajo de 1,46, la proporción en peso del fluido de silicona no volátil con respecto al componente de resina de silicona varía de aproximadamente 4:1 a aproximadamente 400:1, en un aspecto, de aproximadamente 9:1 a aproximadamente 200:1, en otro aspecto, de aproximadamente 19:1 a aproximadamente 100:1 en un aspecto adicional, particularmente cuando el componente de fluido de silicona es un fluido de polidimetilsiloxano o una mezcla de fluido de polidimetilsiloxano y goma de polidimetilsiloxano como se ha descrito anteriormente. En la medida en que la resina de silicona forme parte de la misma fase en las composiciones del presente documento como el fluido de silicona, es decir, la sustancia activa acondicionadora, se ha de incluir la suma del fluido y de la resina en la determinación del nivel de agente acondicionador de silicona en la composición.

Las siliconas volátiles descritas anteriormente incluyen polidimetilsiloxanos cíclicos y lineales, y similares. Como se ha descrito anteriormente en la fórmula de polisiloxanos cíclicos (ciclometiconas), normalmente contienen de aproximadamente 3 a aproximadamente 7 átomos de silicio, alternándose con átomos de oxígeno, en una estructura de anillo cíclico. Sin embargo, cada sustituyente R²⁰ y la unidad de repetición, k, de la fórmula se selecciona de modo que el compuesto sea no volátil. Por lo general, el sustituyente R²⁰ está sustituido con dos grupos alquilo (por ejemplo, grupos metilo). Las siliconas volátiles lineales son fluidos de silicona, como se ha descrito anteriormente, que tienen viscosidades de no más de aproximadamente 25 mPa.s. "Volátil" significa que la silicona tiene una presión de vapor medible, o una presión de vapor de al menos 2 mm de Hg a 20 °C. Las siliconas no volátiles tienen

una presión de vapor inferior a 2 mm de Hg a 20 °C. En Todd y Byers, "Volatile Silicone Fluids for Cosmetics", Cosmetics and Toiletries, Vol. 91(1), pág. 27-32 (1976), y en Kasprzak, "Volatile Silicones", Soap/Cosmetics/Chemical Specialties, pág. 40-43 (diciembre de 1986).se encuentra una descripción de siliconas volátiles cíclicas y lineales.

5 Las ciclometiconas volátiles ilustrativas incluyen ciclometicona D4 (octametilciclotetrasiloxano), ciclometicona D5 (decametilciclopentasiloxano), ciclometicona D6 (dodecametilciclohexasiloxano), y mezclas de los mismos (por ejemplo, D4/D5 y D5/D6). Las ciclometiconas volátiles y las mezclas de ciclometicona se encuentran disponibles en el mercado en Momentive Performance Materials Inc. como SF1202, SF 1214, SF1256, SF1258 y, Dow Corning,
10 Midland, MI con las designaciones de productos líquidos de ciclometicona Xiameter® PMX-0244, PMX-245, PMX-246, PMX-345 y fluido Dow Corning® 1401. También se contemplan las mezclas de ciclometiconas volátiles y dimeticonas lineales volátiles.

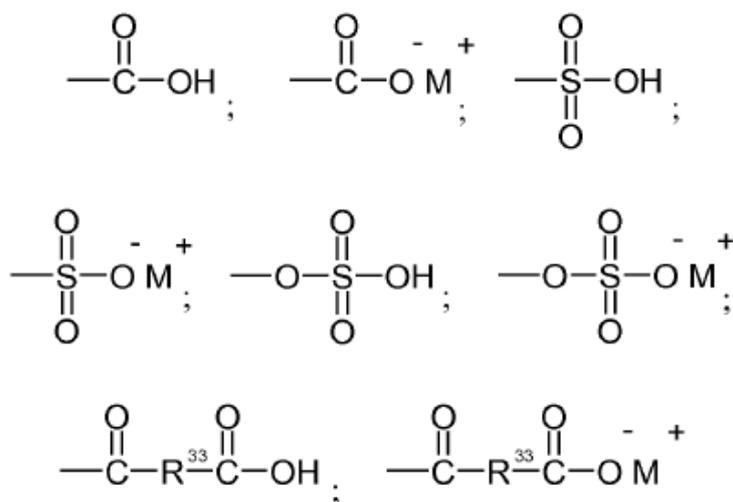
15 Las dimeticonas lineales volátiles ilustrativas incluyen hexametildisiloxano, octametiltrisiloxano, decametiltetrasiloxano, dodecametilpentasiloxano y mezclas de los mismos. Las dimeticonas lineales volátiles y las mezclas de dimeticona se encuentran disponibles en el mercado en Dow Corning como fluidos de silicona PMX-200 Xiameter® (por ejemplo, designaciones de producto 0.65 CS, 1 CS, 1.5 CS y 2 CS) y fluido de silicona PMX 2-1184 Xiameter®.

20 Las siliconas emulsionadas también son adecuadas para su uso en las composiciones a base de tensioactivos ilustrativas. En un aspecto, las siliconas emulsionadas adecuadas son emulsiones de dimeticona con al menos un emulsionante seleccionado entre tensioactivos no iónicos, aniónicos, anfóteros, catiónicos y/o polímero catiónico y mezclas de los mismos. En un aspecto, las emulsiones de silicona útiles tienen un tamaño medio de partícula de silicona en la composición inferior a 30 µm, inferior a 20 µm en otro aspecto e inferior a 10 µm en un aspecto
25 adicional. En otro aspecto, el tamaño medio de partícula de silicona de la silicona emulsionada en la composición es inferior a 2 µm, y en otro, varía de 0,01 a 1 µm. Las emulsiones de silicona que tienen un tamaño medio de partícula de silicona < 0,15 µm, en general, se denominan microemulsiones. El tamaño de partícula se puede medir por medio de una técnica de dispersión de luz láser, usando un calibrador del tamaño de partícula 2600D de Malvern Instruments. Las emulsiones de silicona adecuadas para su uso en las composiciones a base de tensioactivos
30 ilustrativas también se encuentran disponibles en el mercado en forma pre-emulsionada. Los ejemplos de emulsiones preformadas disponibles en el mercado adecuadas incluyen las emulsiones Dow Corning® MEM-1664, 2-1352, MEM-1764, MEM-1784, HMW 2220, 2-1865, MEM-1310, MEM-1491 y 5-7137. Se trata de emulsiones/microemulsiones de dimeticonol. También hay emulsiones preformadas de silicona amino-funcional disponibles en proveedores de aceites de silicona tales como Dow Corning (CE-8170, 5-7113, 2-8194, 949 y CE 8401) y Momentive Performance Materials. Son particularmente adecuadas las emulsiones de aceites de silicona amino-funcionales con tensioactivo no iónico y/o catiónico. Los ejemplos incluyen la emulsión catiónica 939, la emulsión catiónica 949, la microemulsión catiónica 2-8194 y la emulsión catiónica 2-8299 y la emulsión no iónica 2-8177 Dow Corning®; así como SM2115 y SME253, microemulsiones no iónicas suministradas por Momentive Performance Materials. También se pueden usar mezclas de cualquiera de los tipos anteriores de silicona. Otros
40 ejemplos de siliconas amino-funcionales son los aceites de aminosilicona. Los aceites de aminosilicona disponibles en el mercado adecuados incluyen Dow Corning® Q2-8166, Q2-8220 y 2-8566; y SF 1708, (Momentive Performance Materials).

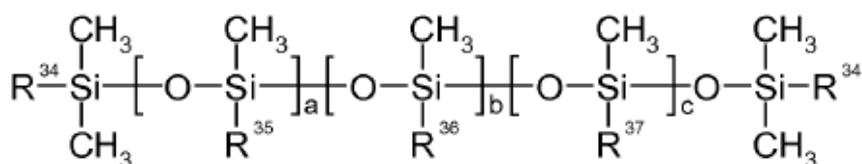
45 Otros aceites de silicona adecuados incluyen los copolíoles de dimeticona, que son copolímeros lineales o ramificados de dimetilsiloxano (dimeticona) modificados con unidades de óxido de alquileo. Las unidades de óxido de alquileo se pueden organizar como copolímeros aleatorios o de bloque. Una clase generalmente útil de políoles de dimeticona incluye copolímeros de bloques que tienen bloques terminales y/o pendientes de polidimetilsiloxano y bloques de óxido de polialquileo, tales como bloques de óxido de polietileno, óxido de polipropileno, o ambos. Los copolíoles de dimeticona pueden ser hidrosolubles o no hidrosolubles dependiendo de la cantidad de óxido de polialquileo presente en el polímero de dimeticona, y pueden ser de carácter aniónico, catiónico o no iónico.
50

También se pueden usar siliconas hidrosolubles o hidrodispersables en las composiciones a base de tensioactivos ilustrativas. Dichas siliconas hidrosolubles contienen la funcionalidad aniónica, funcionalidad catiónica y/o funcionalidad no iónica adecuadas para volver la silicona hidrosoluble o hidrodispersable. En un aspecto, las
55 siliconas hidrosolubles contienen una cadena principal de polisiloxano a la que se injerta al menos una fracción aniónica. La fracción aniónica se puede injertar en un extremo terminal de la cadena principal de polisiloxano, o se puede injertar como un grupo lateral pendiente, o ambos. Grupo aniónico pretende significar cualquier fracción de hidrocarburo que contenga al menos un grupo aniónico o al menos un grupo que se pueda ionizar a un grupo aniónico después de la neutralización por una base. Como se ha descrito previamente, la cantidad de los grupos de hidrocarburo de carácter aniónico que se injertan en la cadena de silicona se selecciona de modo que el derivado de silicona correspondiente sea hidrosoluble o hidrodispersable después de la neutralización de los grupos ionizables con una base. Los derivados de silicona aniónicos se pueden seleccionar entre los productos comerciales existentes o se pueden sintetizar mediante cualquier medio conocido en la técnica. Las siliconas no iónicas contienen unidades de cadena terminal y/o lateral pendiente de óxido de alquileo (por ejemplo, los copolíoles de dimeticona descritos anteriormente). Otro ejemplo de siliconas no iónicas son los poliglucósidos de silicona de Wacker (por ejemplo, Wacker-Belsil® SPG 128 VP, SPG 130 VP y VSR 100 VP).
65

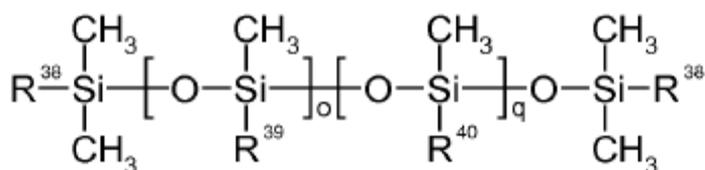
- donde R²⁸ y R²⁹ se seleccionan independientemente entre alquilo C₁-C₃₀, arilo C₆-C₁₄, aralquilo C₇-C₁₅, alcarilo C₁-C₁₅ o un grupo alqueniilo de 1 a 40 átomos de carbono, hidroxilo, -R³²-G' o -(CH₂)₃O(EO)_a(PO)_b(EO)_c-G', con la condición de que tanto R²⁸ como R²⁹ no sean metilo; R³⁰ se selecciona entre alquilo C₁-C₁₅ o fenilo; en esta fórmula a, b y c son números enteros que varían independientemente de 0 a 100; EO es óxido de etileno, -(CH₂CH₂O)-; PO es óxido de propileno, -(CH₂CH(CH₃)O)-; en esta fórmula o es un número entero que varía de 1 a 200, p es un número entero que varía de 0 a 200, y q es un número entero que varía de 0 a 1.000; R³¹ es hidrógeno, alquilo C₁-C₃₀, arilo, aralquilo C₇-C₁₅, alcarilo C₇-C₁₅ o grupo alqueniilo de 1 a 40 átomos de carbono o -C(O)-X, donde X es alquilo C₁-C₃₀, arilo C₆-C₁₄, aralquilo C₇-C₁₅, alcarilo C₁-C₁₅, o un grupo alqueniilo de 1 a 40 átomos de carbono, o una mezcla de los mismos; R³² es un grupo divalente seleccionado entre radical alqueniilo de 1 a 40 átomos de carbono que puede estar interrumpido con grupo arileno de 6 a 18 átomos de carbono o un grupo alqueniilo que contiene insaturación de 2 a 8 átomos de carbono; y G' se selecciona independientemente entre una fracción representada por la fórmula:



- donde R³³ es un grupo divalente seleccionado entre alqueniilo de 1 a 40 átomos de carbono, un grupo insaturado que contiene de 2 a 5 átomos de carbono o un grupo arileno de 6 a 12 átomos de carbono; M es un catión seleccionado entre Na, K, Li, NH₄, o una amina que contiene al menos un grupo alquilo C₁-C₁₀, arilo C₆-C₁₄ (por ejemplo, fenilo, naftilo), alqueniilo C₂-C₁₀, hidroxialquilo C₁-C₁₀, arilalquilo C₇-C₂₄ o alcarilo C₇-C₂₄. Los radicales R³³ representativos son: -CH₂CH₂-, -CH=CH-, -CH=CHCH₂- y fenileno.
- En otra realización, las siliconas hidrosolubles útiles en las composiciones a base de tensioactivos ilustrativas se pueden representar como un copoliol de silicona aniónico representado por la fórmula:



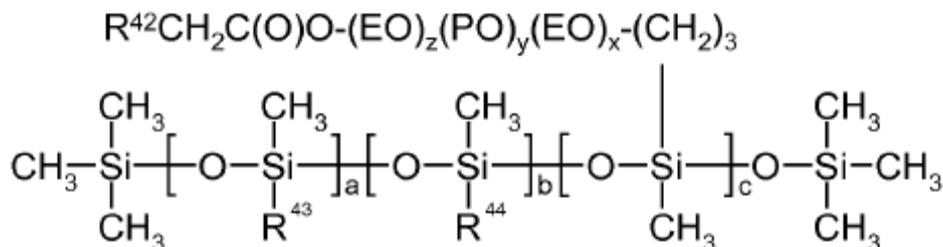
- donde R³⁴ es metilo o hidroxilo; R³⁵ se selecciona entre alquilo C₁-C₈ y fenilo; R³⁶ representa el radical -(CH₂)₃O(EO)_x(PO)_y(EO)_z-SO₃⁻M⁺; donde M es un catión seleccionado entre Na, K, Li y NH₄; en esta fórmula x, y y z son números enteros que varían independientemente de 0 a 100; R³⁷ representa el radical -(CH₂)₃O(EO)_x(PO)_y(EO)_z-H; en esta fórmula a y c representan independientemente números enteros que varían de 0 a 50, y b es un número entero que varía de 1 a 50; EO es óxido de etileno, por ejemplo, -(CH₂CH₂O)-; PO es óxido de propileno, por ejemplo, -(CH₂CH(CH₃)O)-.
- En otra realización más, las siliconas hidrosolubles usadas en las composiciones a base de tensioactivos ilustrativas se pueden representar como un copoliol de silicona aniónico representado por la fórmula:



donde R³⁸ y R³⁹ son independientemente -CH₃ o un radical representado por: -(CH₂)₃O(EO)_a(PO)_b(EO)_c-C(O)-R⁴¹-C(O)OH, sujeto a la condición de que tanto R³⁸ como R³⁹ no sean -CH₃ al mismo tiempo; R⁴¹ se selecciona entre el

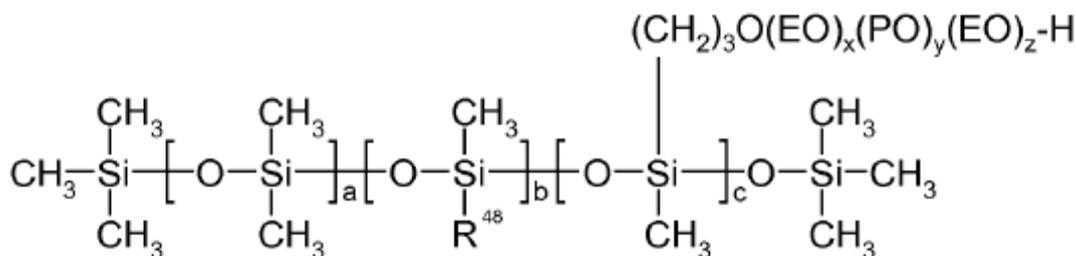
radical divalente -CH₂CH₂-, -CH=CH- y fenileno; R⁴⁰ se selecciona entre alquilo C₁-C₅ y fenilo; en esta fórmula a, b y c son números enteros que varían independientemente de 0 a 20; EO es un resto de óxido de etileno, por ejemplo, -(CH₂CH₂O)-; PO es un resto de óxido de propileno, por ejemplo, -(CH₂CH(CH₃)O)-; en esta fórmula o es un número entero que varía de 1 a 200 y q es un número entero que varía de 0 a 500.

5 Otras siliconas hidrosolubles útiles son polímeros de copoliol de silicona cuaternizados. Estos polímeros tienen un grupo funcional de nitrógeno cuaternario pendiente presente y están representados por la fórmula:



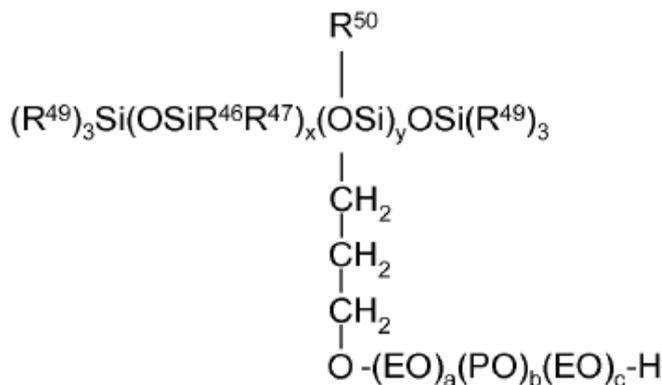
10 donde R⁴² representa un sustituyente cuaternario -N+R⁴⁵R⁴⁶R⁴⁷CA⁻, donde R⁴⁵ y R⁴⁶, y R⁴⁷, independientemente, se seleccionan entre hidrógeno y alquilo C₁-C₂₄ lineal y ramificado, y CA⁻ representa un contranión adecuado para equilibrar la carga catiónica en el átomo de nitrógeno; R⁴³ se selecciona entre alquilo C₁-C₁₀ y fenilo; R⁴⁴ es -(CH₂)₃O(EO)_x(PO)_y(EO)_z-H, donde EO es un resto de óxido de etileno, por ejemplo, -(CH₂CH₂O)-; PO es un resto de óxido de propileno, por ejemplo, -(CH₂CH(CH₃)O)-; en esta fórmula a es un número entero de 0 a 200, b es un número entero de 0 a 200, y c es un número entero de 1 a 200; en esta fórmula x, y y z son números enteros y se seleccionan independientemente entre 0 a 20. En un aspecto, el contranión CA⁻ representa un anión seleccionado entre cloruro, bromuro, yoduro, sulfato, metilsulfato, sulfonato, nitrato, fosfato y acetato.

15 Otras siliconas hidrosolubles adecuadas son los copolios de silicona sustituidos con amina representados por la fórmula:



20 donde R⁴⁸ se selecciona entre -NH(CH₂)_nNH₂ y -(CH₂)_nNH₂; en esta fórmula n es un número entero de 2 a 6; y x, n es un número entero de 0 a 20; donde EO es un resto de óxido de etileno, por ejemplo, -(CH₂CH₂O)-; PO es un resto de óxido de propileno, por ejemplo, -(CH₂CH(CH₃)O)-; en esta fórmula a es un número entero de 0 a 200, b es un número entero de 0 a 200, y c es un número entero de 1 a 200; en esta fórmula x, y y z son números enteros y se seleccionan independientemente entre 0 a 20.

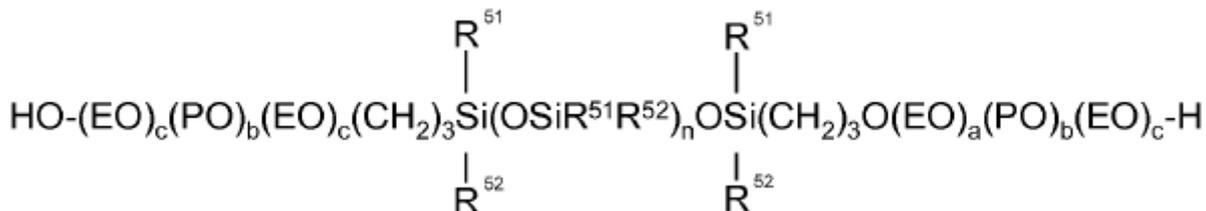
25 Otras siliconas hidrosolubles más se pueden seleccionar entre copolios de silicona no iónicos (copolios de dimeticona) representados por la fórmula:



30 donde cada R⁴⁹ representa independientemente un radical seleccionado entre alquilo C₁-C₃₀, arilo C₆-C₁₄ y alquenoilo

C₂-C₂₀; R⁵⁰ representa un radical seleccionado entre alquilo C₁-C₃₀, arilo C₆-C₁₄ y alqueno C₂-C₂₀; EO es un resto de óxido de etileno, por ejemplo, -(CH₂CH₂O)-; PO es un resto de óxido de propileno, por ejemplo, -(CH₂CH(CH₃)O)-; en esta fórmula a, b y c son independientemente de 0 a 100; en esta fórmula x es de 0 a 200; e y es de 1 a 200.

- 5 En otra realización, las siliconas hidrosolubles se pueden seleccionar entre copolioses de silicona no iónicas representados por la fórmula:



- 10 donde R⁵¹ y R⁵² representan independientemente un radical seleccionado entre alquilo C₁-C₃₀, arilo C₆-C₁₄ y alqueno C₂-C₂₀; EO es un resto de óxido de etileno, por ejemplo, -(CH₂CH₂O)-; PO es un resto de óxido de propileno, por ejemplo, -(CH₂CH(CH₃)O)-; en esta fórmula a, b y c son independientemente de 0 a 100; y en esta fórmula n es de 0 a 200.

- 15 En las fórmulas expuestas anteriormente, los restos de EO y PO pueden estar dispuestos aleatoriamente, no aleatoriamente o en secuencias de bloques.

- 20 Las siliconas hidrosolubles se divulgan en las patentes de EE.UU. n.º 5.136.063 y 5.180.843. Dichas siliconas se encuentran disponibles en el mercado con los nombres comerciales Silsoft® y Silwet® de Momentive Performance Materials. Las designaciones de productos específicos incluyen, pero sin limitación, las designaciones de los productos Silsoft 430, 440, 475, 805, 810, 840, 870, 875, 880, 895, 900 y 910; la designación del producto Silwet L-7604. Otros productos disponibles en el mercado incluyen Dow Corning® 5103 y 5329; las designaciones de los productos Abil® B 88183, B 8843, Evonik Goldschmidt y copolioses de dimeticon Silsense™ tales como Copoliol-1 Silsense y Copoliol-7 Silsense, disponibles en Lubrizol Advanced Materials, Inc., Cleveland, OH.

- 25 La concentración de los agentes de silicona descritos anteriormente puede variar del aproximadamente 0,01 % al aproximadamente 10 % en peso de la base de tensioactivo. En otro aspecto, la cantidad de agente de silicona varía del aproximadamente 0,1 % al aproximadamente 8 %, del aproximadamente 0,1 % al aproximadamente 5 % en otro aspecto, y del aproximadamente 0,2 % al aproximadamente 3 % en peso en un aspecto adicional, todo basado en el peso total de la composición.

30 Emolientes

- 35 Los emolientes adecuados pueden incluir aceites minerales; vaselinas; aceites vegetales; aceites de pescado; alcoholes grasos; ácidos grasos; ésteres de ácidos grasos y de alcoholes grasos; alcoholes grasos alcoxilados; ésteres de ácidos grasos alcoxilados; ésteres de benzoato; ésteres de Guerbet; derivados de alquiléter de polietilenglicoles tales como, por ejemplo, metoxipolietilenglicol (MPEG); polialquilenglicoles; lanolina y derivados de lanolina; mezclas de los mismos y similares. Los fluidos de silicona (por ejemplo, los aceites de silicona volátiles y los aceites de silicona no volátiles descritos anteriormente), también pueden servir como emolientes.

- 40 Los aceites minerales y las vaselinas incluyen cosméticos, de grados USP y NF, y se encuentran disponibles en el mercado en Penreco con los nombres comerciales Drakeol® y Penreco®. El aceite mineral incluye hexadecano y aceite de parafina.

- 45 Los emolientes de alcoholes grasos adecuados incluyen alcoholes grasos que contienen de 8 a 30 átomos de carbono. Los alcoholes grasos ilustrativos incluyen alcohol caprílico, alcohol pelargónico, alcohol cáprico, alcohol laurílico, alcohol miristílico, alcohol cetílico, alcohol isocetílico, alcohol estearílico, alcohol isoestearílico, alcohol cetearílico, alcohol oleílico, ricinoleílico alcohol, alcohol araquidílico, alcohol icocenílico, alcohol behenílico y mezclas de los mismos.

- 50 Los emolientes de ácidos grasos adecuados incluyen ácidos grasos que contienen de 10 a 30 átomos de carbono. Los ejemplos de ácidos grasos se seleccionan entre ácido cáprico, ácido láurico, ácido mirístico, ácido palmítico, ácido esteárico, ácido oleico, ácido linoleico, ácido araquídico, ácido behénico, y mezclas de los mismos.

- 55 Los ejemplos de los emolientes de éster de ácido graso y alcohol graso incluyen laurato de hexilo, oleato de decilo, estearato de isopropilo, isoestearato de isopropilo, estearato de butilo, estearato de octilo, estearato de cetilo, miristato de miristilo, estearoil-estearato de octildodecilo, octilhidroxiestearato, adipato de diisopropilo, miristato de isopropilo, palmitato de isopropilo, palmitato de etilhexilo, oleato de isodecilo, neopentanoato de isodecilo, sebacato de diisopropilo, lactato de isoestearilo, lactato de laurilo, maleato de dietilhexilo, propionato de PPG-14-butiléter y de

PPG-2-miristiléter, octanoato de cetearilo, y mezclas de los mismos.

Los emolientes alcoxilados de alcoholes grasos son éteres formados a partir de la reacción de un alcohol graso con un óxido de alquileo, en general, óxido de etileno u óxido de propileno. Los alcoholes grasos etoxilados adecuados son aductos de alcoholes grasos y óxido de polietileno. En un aspecto, los alcoholes grasos etoxilados se pueden representar por la fórmula $R'-(OCH_2CH_2)_n-OH$, donde R' representa el resto alifático del alcohol graso precursor y n representa el número de moléculas de óxido de etileno. En otro aspecto, R' se obtiene de un alcohol graso que contiene de 8 a 30 átomos de carbono. En un aspecto, n es un número entero que varía de 2 a 50, de 3 a 25, en otro aspecto, y de 3 a 10 en un aspecto adicional. En un aspecto adicional, R' se obtiene de un emoliente de alcohol graso expuesto anteriormente. Los alcoholes grasos etoxilados ilustrativos incluyen alcohol caprílico etoxilado, alcohol laurílico etoxilado, alcohol miristílico etoxilado, alcohol cetílico etoxilado, alcohol estearílico etoxilado, alcohol cetearílico etoxilado, alcohol oleico etoxilado y alcohol behenílico etoxilado, donde el número de unidades de óxido de etileno de cada uno de los anteriores productos etoxilados puede variar de 2 a más en un aspecto, y de 2 a aproximadamente 150, en otro aspecto. También se contemplan los aductos propoxilados de los alcoholes grasos anteriores y los aductos etoxilados/propoxilados mixtos de los alcoholes grasos anteriores. Las unidades de óxido de etileno y de óxido de propileno de los alcoholes grasos etoxilados/propoxilados pueden estar dispuestas al azar u ordenados por bloques.

Los ejemplos más específicos de alcoholes etoxilados incluyen Beheneth 5-30 (significando 5-30 el intervalo de unidades de repetición de óxido de etileno), Ceteareth 2-100, Ceteth 1-45, Cetoeth 24-25, Choeth 10-24, Coceth 3-10, C9-11 pareth 3-8, C11-15 pareth 5-40, C11-21 Pareth 3-10, C12-13 pareth 3-15, Deceth 4-6, Dodoxinol 5-12, Glicereth 7-26, Isoceteth 10-30, Isodeceth 4-6, Isolaureth 3-6, isosteareth 3-50, Laneth 5-75, Laureth 1-40, Nonoxinol 1-120, Nonilnonoxinol 5-150, Octoxinol 3-70, Oleth 2-50, PEG 4-350, Steareth 2-100 y Trideceth 2-10.

Los ejemplos específicos de alcoholes propoxilados incluyen PPG-10-cetiléter, PPG-20-cetiléter, PPG-28-cetiléter, PPG-30-cetiléter, PPG-50-cetiléter, PPG-2-éter de alcohol lanolínico, PPG-5-éter de alcohol lanolínico, PPG-10-éter de alcohol lanolínico, PPG-20-éter de alcohol lanolínico, PPG-30-éter de alcohol lanolínico, PPG-4-lauriléter, PPG-7-lauriléter, PPG-10-oleiléter, PPG-20-oleiléter, PPG-23-oleiléter, PPG-30-oleiléter, PPG-37-oleiléter, PPG-50-oleiléter, PPG-11-esteariléter, PPG-15-esteariléter, PPG-2-lanolinéter, PPG-5-lanolinéter, PPG-10-lanolinéter, PPG-20-lanolinéter, PPG-30-lanolinéter y PPG-1-miristiléter.

Los ejemplos específicos de alcoholes etoxilados/propoxilados incluyen PPG-1-Beheneth-15, PPG-12-Caprieth-18, PPG-2-Cetareth-9, PPG-4-Cetareth-12, PPG-10-Cetareth-20, PPG-1-Ceteth-1, PPG-1-Ceteth-5, PPG-1-Ceteth-10, PPG-1-Ceteth-20, PPG-2-Ceteth-1, PPG-2-Ceteth-5, PPG-2-Ceteth-10, PPG-2-Ceteth-20, PPG-4-Ceteth-1, PPG-4-Ceteth-5, PPG-4-Ceteth-10, PPG-4-Ceteth-20, PPG-5-Ceteth-20, PPG-8-Ceteth-1, PPG-8-Ceteth-2, PPG-8-Ceteth-5, PPG-8-Ceteth-10, PPG-8-Ceteth-20, PPG-2-Pareth-8 C₁₂₋₁₃, PPG-2-Pareth-6 C₁₂₋₁₅, PPG-4-Pareth-15 C₁₃₋₁₅, PPG-5-Pareth-6 C₉₋₁₅, PPG-6-Pareth-5 C₉₋₁₁, PPG-6-Pareth-12-C₁₂₋₁₅, PPG-6-Pareth-11 C₁₂₋₁₈, PPG-3-Sec-Pareth-7 C₁₂₋₁₄, PPG-4-Sec-Pareth-5 C₁₂₋₁₄, PPG-5-Sec-Pareth-7 C₁₂₋₁₄, PPG-5-Sec-Pareth-9 C₁₂₋₁₄, PPG-1-Deceth-6, PPG-2-Deceth-3, PPG-2-Deceth-5, PPG-2-Deceth-7, PPG-2-Deceth-10, PPG-2-Deceth-12, PPG-2-Deceth-15, PPG-2-Deceth-20, PPG-2-Deceth-30, PPG-2-Deceth-40, PPG-2-Deceth-50, PPG-2-Deceth-60, PPG-4-Deceth-4, PPG-4-Deceth-6, PPG-6-Deceth-4, PPG-6-Deceth-9, PPG-8-Deceth-6, PPG-14-Deceth-6, PPG-6-Deciltetradeceth-12, PPG-6-Deciltetradeceth-20, PPG-6-Deciltetradeceth-30, PPG-13-Deciltetradeceth-24, PPG-20-Deciltetradeceth-10, PPG-2-Isodeceth-4, PPG-2-Isodeceth-6, PPG-2-Isodeceth-8, PPG-2-Isodeceth-9, PPG-2-Isodeceth-10, PPG-2-Isodeceth-12, PPG-2-Isodeceth-18, PPG-2-Isodeceth-25, PPG-4-Isodeceth-10, PPG-12-Laneth-50, PPG-2-Laureth-5, PPG-2-Laureth-8, PPG-2-Laureth-12, PPG-3-Laureth-8, PPG-3-Laureth-9, PPG-3-Laureth-10, PPG-3-Laureth-12, PPG-4-Laureth-2, PPG-4-Laureth-5, PPG-4-Laureth-7, PPG-4-Laureth-15, PPG-5-Laureth-5, PPG-6-Laureth-3, PPG-25-Laureth-25, PPG-7-lauriléter, PPG-3-Myreth-3, PPG-3-Myreth-11, PPG-20-PEG-20-lanolina hidrogenada, PPG-2-PEG-11-éter de alcohol laurílico hidrogenado, PPG-12-PEG-50-Lanolina, PPG-12-PEG-65-aceite de lanolina, PPG-40-PEG-60-aceite de lanolina, PPG-1-PEG-9-laurilglicoléter, PPG-3-PEG-6-oleiléter, PPG-23-Steareth-34, PPG-30-Steareth-4, PPG-34-Steareth-3, PPG-38-Steareth-6, PPG-1-Trideceth-6, PPG-4-Trideceth-6 y PPG-6-Trideceth-8.

Los emolientes de ácidos grasos alcoxilados se forman cuando un ácido graso se hace reaccionar con un óxido de alquileo o con un éter polimérico preformado. El producto resultante puede ser un monoéster, un diéster o una mezcla de los mismos. Los emolientes de ésteres de ácidos grasos etoxilados adecuados para su uso en el presente documento son productos de adición de óxido de etileno a ácidos grasos. El producto es un éster de óxido de polietileno de un ácido graso. En un aspecto, los ésteres de ácidos grasos etoxilados se pueden representar por la fórmula $R''-C(O)(CH_2CH_2O)_n-H$, donde R'' representa el resto alifático de un ácido graso y n representa el número de moléculas de óxido de etileno. En otro aspecto, n es un número entero que varía de 2 a 50, de 3 a 25 en otro aspecto y de 3 a 10 en un aspecto adicional. En otro aspecto más, R'' se obtiene de un ácido graso que contiene de 8 a 24 átomos de carbono. En un aspecto adicional más, R'' se obtiene de un emoliente de ácido graso como se ha expuesto anteriormente. Se ha de reconocer que también se contemplan los productos propoxilados y los productos etoxilados/propoxilados de los ácidos grasos anteriores. Los ésteres de ácidos grasos alcoxilados ilustrativos incluyen, pero sin limitación, ácido cáprico etoxilado, ácido láurico etoxilado, ácido mirístico etoxilado, ácido esteárico etoxilado, ácido oleico etoxilado, ácido graso de coco etoxilado y monolaurato de polietilenglicol 400 propoxilado, donde el número de unidades de óxido de etileno de cada uno de los productos etoxilados anteriores puede variar de 2 a más en un aspecto, y de 2 a aproximadamente 50, en otro aspecto. Los ejemplos más

específicos de ácidos grasos etoxilados son PEG-8-diesterato (significando el 8 el número de unidades de repetición de óxido de etileno), PEG-8-behenato, PEG-8-caprato, PEG-8-caprilato, PEG-8-caprilato/caprato, PEG-cocoatos (significando PEG sin una designación numérica que el número de unidades de óxido de etileno varía de 2 a 50), PEG-15-dicocoato, PEG-2-diisononanoato, PEG-8-diisosteato, PEG-dilauratos, PEG-dioleatos, PEG diesteratos, PEG-ditalatos, PEG -isosteato, PEG-ácidos de jojoba, PEG-lauratos, PEG-linolenatos, PEG-miristatos, PEG-oleatos, PEG-palmitatos, PEG-ricinoleatos, PEG-esteratos, PEG-talatos, y similares.

Los emolientes de éster de Guerbet se forman a partir de la reacción de esterificación de un alcohol de Guerbet con un ácido carboxílico. Los emolientes de ésteres de Guerbet se encuentran disponibles en el mercado en Lubrizol Advanced Materials, Inc. con las denominaciones de producto G-20, G-36, G-38 y G-66.

La lanolina y los derivados de lanolina se seleccionan entre lanolina, cera de lanolina, aceite de lanolina, alcoholes de lanolina, ácidos grasos de lanolina, lanolina alcoxilada, lanolato de isopropilo, alcoholes de lanolina acetilados, y combinaciones de los mismos. La lanolina y los derivados de lanolina se encuentran disponibles en el mercado en Lubrizol Advanced Materials, Inc. con los nombres comerciales de lanolina LP 108 USP, lanolina USP AAA, Acetulan™, Ceralan™, Lanocerin™, Lanogel™ (designaciones de producto 21 y 41), Lanogene™, Modulan™, Ohlan™, Solulan™ (designaciones de producto 16, 75, L-575, 98 y C-24), Vilvanolin™ (denominaciones de producto C, CAB, L-101 y P).

El/los emoliente/s (a excepción de las siliconas descritas anteriormente) se puede/n utilizar en una cantidad que varía del aproximadamente 0,5 % en peso al aproximadamente 30 % en peso de la composición total para el cuidado personal en un aspecto, del 0,1 % en peso al 25 % en peso en otro aspecto, y del 5 % en peso al 20 % en peso en un aspecto adicional. Aunque los emolientes, en general, se emplean en composiciones para el cuidado personal, se pueden emplear en composiciones para el cuidado del hogar, el cuidado de salud y el cuidado institucional en las mismas proporciones en peso que se exponen para las composiciones para el cuidado personal, siempre que efectúen un atributo físico deseado (por ejemplo, propiedades humectantes) en dichas composiciones.

Agentes nacarados

Algunas formulaciones se opacifican incorporando deliberadamente materiales nacarados en las mismas para lograr un aspecto nacarado estéticamente atractivo, conocido como efecto nacarado. Un opacificante se suele incluir en una composición para enmascarar una propiedad estética no deseada, tal como para mejorar el color de una composición que se haya oscurecido debido a la presencia de un determinado ingrediente, o para enmascarar la presencia de materia particulada en la composición. Los opacificantes también se incluyen en las composiciones acuosas para mejorar la estética y la aceptación por parte del consumidor de una composición que, de lo contrario, sería estéticamente desagradable. Por ejemplo, un opacificante puede conferir un aspecto nacarado a una composición transparente, transmitiendo así un aspecto de cremosidad, suavidad y cuerpo al consumidor. Los expertos en la materia son conscientes de los problemas a los que se enfrentan los formuladores en la preparación de manera consistente de una formulación nacarada estable. En el artículo "Opacifiers and pearling agents in shampoos" de Hunting, Cosmetic and Toiletries, Vol. 96, páginas 65-78 (julio de 1981), se encuentra una descripción detallada. El material opacificante o nacarado puede incluir uno o más de entre monoesterato de etilenglicol, diesterato de etilenglicol, diesterato de polietilenglicol, alcohol esteárico, mica recubierta de oxocloruro de bismuto, óxidos metálicos recubiertos de mica (por ejemplo, dióxido de titanio, óxido de cromo, óxidos de hierro), miristato de miristilo, guanina, recubierta (poliéster o metálica), sales de aluminio y de magnesio, y compuestos orgánicos, como alcoholes grasos, ésteres grasos y diversos polímeros y copolímeros, y mezclas de los mismos. Otros materiales nacarados/opacificantes se pueden encontrar en las patentes de EE.UU. n.º 4.654.207; 5.019.376; y 5.384.114, y en el Manual CTFA Cosmetic Ingredient Handbook, J. Nikitakis, ed., The Cosmetic, Toiletry and Fragrance Association, Inc., Washington, D. C., 1988, en la página 75.

En un aspecto, la cantidad del material nacarado/opacificante en la composición acuosa a base de tensioactivos puede variar del 0,05 % en peso al 10 % en peso, o del 0,1 % en peso al 3 % en peso.

Colorantes

Los colorantes incluyen pigmentos y tintes. Los pigmentos y colorantes ilustrativos incluyen compuestos metálicos o compuestos semimetálicos, y se pueden usar en forma iónica, no iónica u oxidada. Los pigmentos pueden estar de esta forma ya sea individualmente o en mezcla, o en forma de óxidos mixtos individuales o mezclas de los mismos, incluyendo las mezclas de óxidos mixtos y óxidos puros. Los ejemplos incluyen óxidos de titanio (por ejemplo, TiO₂), óxidos de cinc (por ejemplo, ZnO), óxidos de aluminio (por ejemplo, Al₂O₃), óxidos de hierro (por ejemplo, Fe₂O₃), óxidos de manganeso (por ejemplo, MnO), óxidos de silicio (por ejemplo, SiO₂), silicatos, óxido de cerio, óxidos de circonio (por ejemplo, de ZrO₂), sulfato de bario (BaSO₄), y mezclas de los mismos.

Otros ejemplos de pigmentos incluyen Rojo D & C n.º 30, Rojo D & C n.º 36, Naranja D & C n.º 17, Laca colorante Verde 3, Laca colorante Amarilla Ext. 7, Laca colorante Naranja 4, Laca colorante Roja 28, las laca colorantes de calcio de Rojo D & C n.º 7, 11, 31 y 34, Laca colorante de bario de Rojo D & C n.º 12, Laca colorante de estroncio de Rojo D & C n.º 13, Laca colorante de aluminio de Amarillo FD & C n.º 5 y n.º 6, las laca colorantes de aluminio de FD

& C n.º 40, las lacas colorantes de aluminio de Rojo D & C n.º 21, 22, 27 y 28, las lacas colorantes de aluminio de Azul FD & C n.º 1, las lacas colorantes aluminio de Naranja D & C n.º 5, las lacas colorantes de aluminio de Amarillo D & C n.º 10; las lacas colorantes de circonio de Rojo D & C n.º 33, óxidos de hierro, colorantes termocrómicos que cambian de color con la temperatura, carbonato de calcio, hidróxido de aluminio, sulfato de calcio, caolín, ferrocianuro de amonio férrico, carbonato de magnesio, carmín, sulfato de bario, mica, oxiclورو de bismuto, estearato de cinc, violeta de manganeso, óxido de cromo, nanopartículas de dióxido de titanio, óxido de bario, azul ultramarino, citrato de bismuto, hidroxiapatita, silicato de circonio, partículas de negro de carbono y similares. Otros pigmentos adecuados incluyen diversos modificadores ópticos como se describe en el documento US 7.202.199.

10 Materiales particulados distintos de los pigmentos

En la técnica, se conocen numerosos agentes exfoliantes particulados cosméticamente útiles, y la selección y la cantidad se determinan por el efecto exfoliante deseado del uso de la composición, como se reconoce por los expertos en Cosmética. Los agentes exfoliantes útiles incluyen abrasivos naturales, abrasivos inorgánicos, polímeros sintéticos y similares, y mezclas de los mismos. Los exfoliantes representativos incluyen piedra pómez molida o en polvo, piedra, zeolitas, cáscaras de frutos secos (por ejemplo, almendras, pacanas, nuez, coco y similares), harinas de frutos secos (por ejemplo, almendras y similares), huesos de fruta (por ejemplo, albaricoque, aguacate, aceituna, melocotón y similares), cáscaras, semillas y granos (por ejemplo, salvado de avena, harina de maíz, salvado de arroz, semillas de uva, semilla de kiwi, trigo, semilla de jojoba, semilla de loofah, semilla de rosa mosqueta y similares), materia vegetal (por ejemplo, hojas del árbol del té, mazorca de maíz, fibras de frutas, algas marinas, esponja vegetal, celulosa microcristalina y similares), conchas de bivalvos (concha de ostra y similares), carbonato cálcico, pirofosfato dicálcico, tiza, sílice, caolín, arcilla, ácido silícico, óxido de aluminio, óxido de estaño, sal marina (por ejemplo, sal del mar muerto), talco, azúcares (por ejemplo, de mesa, moreno y similares), polietileno, poliestireno, poliamidas microcristalinas (nilones), poliésteres microcristalinas, policarbonatos y fibras de acero inoxidable. Los exfoliantes anteriores se pueden usar en forma de gránulos, polvos, harinas y fibras.

Otros componentes en general insolubles adecuados para su uso en las presentes composiciones incluyen arcilla, arcilla hinchable, laponita, burbujas de gas, liposomas, microesponjas, perlas de cosméticos y escamas. Las perlas, las escamas y las cápsulas cosméticas se pueden incluir en una composición por el aspecto estético o pueden funcionar como micro- y macro-encapsulantes para el suministro de agentes beneficiosos en la piel y en el cabello. Los componentes de perlas ilustrativos pueden incluir perlas de agar, perlas de alginato, perlas de jojoba, perlas de gelatina, perlas Styrofoam™, poliácido, polimetilmetacrilato (PMMA), perlas de polietileno, perlas cosméticas Unispheres™ y Unipearls™ (Induchem EE.UU., Inc., Nueva York, NY), microcápsulas Lipocapsule™, Liposphere™ y Lipopearl™ (Lipo Technologies Inc., Vandalia, OH) y escapapas de administración dérmica Confetti II™ (United-Guardian, Inc., Hauppauge, NY).

Se puede emplear cualquier agente anticasca adecuado en las composiciones ilustrativas. Los ejemplos de agentes anticasca pueden incluir azufre, piritona de cinc, omadina de cinc, nitrato de miconazol, sulfuro de selenio, olamina de piroctona, *N,N*-bis(2-hidroxiethyl)undecenamida, aceite de enebro, alquitrán de pino, extracto de *Allium cepa*, extracto de *Picea abies* y Undecileneth-6 y similares, y mezclas de los mismos.

En un aspecto, la cantidad de componente particulado puede variar del 0,1 % en peso al 10 % en peso de la composición.

45 Material botánico

Opcionalmente, las composiciones pueden contener extractos de materiales botánicos. Los materiales botánicos extraídos pueden incluir cualquier material hidrosoluble o liposoluble extraído de una determinada planta, fruta, fruto seco o semilla. En un aspecto, en las composiciones antitranspirantes, los activos botánicos están presentes en una cantidad que varía del 0,1 % en peso al 10 % en peso, por ejemplo, del 0,5 % en peso al 8 % en peso, o del 1 % en peso al 5 % en peso de la composición.

Los agentes botánicos adecuados pueden incluir, por ejemplo, extractos de *Echinacea* (por ejemplo, de la especie *angustifolia*, *purpurea*, *pallida*), yuca glauca, hierba del sauce, hojas de albahaca, orégano turco, raíz de zanahoria, pomelo, semillas de hinojo, romero, cúrcuma, tomillo, arándano, pimienta, mora, espirulina, grosella negra, hojas de té tal como, por ejemplo, té chino, té negro (por ejemplo, var. Orange Pekoe floral, Orange Pekoe floral dorado, Orange Pekoe floral dorado Fine Tippy), té verde (por ejemplo, var. japonesa, verde Darjeeling), té oolong, semillas de café, raíz de diente de león, fruto de la palmera datilera, hoja de ginkgo, té verde, baya de espino, regaliz, salvia, fresa, guisante de olor, tomate, fruto de la vainilla, consuelda, árnica, centella asiática, aciano, castaño de indias, hiedra, magnolia, avena, pensamiento, solideo, espino cerval de mar, ortiga blanca y agua de hamamelis. Los extractos botánicos incluyen, por ejemplo, ácido clorogénico, glutatión, glizirricina, neohesperidina, quercetina, rutina, morin, miricetina, ajeno y manzanilla.

65 Polímeros y compuestos catiónicos

Los polímeros y los compuestos catiónicos son útiles en las composiciones acuosas a base de tensioactivos

ilustrativas. Los expertos en la materia reconocerán que muchos de estos agentes catiónicos sirven para múltiples funciones. Por lo general, estos agentes son útiles como acondicionadores (por ejemplo, cabello y piel), agentes antiestáticos, suavizantes de tejidos y como agentes antimicrobianos. Los polímeros catiónicos se pueden derivar sintéticamente u obtener mediante la modificación de polímeros naturales tales como los polisacáridos y los poligalactomananos modificados catiónicamente.

Los polímeros catiónicos representativos pueden incluir homopolímeros y copolímeros derivados de monómeros de éster o de amida acrílicos o metacrílicos polimerizables por radicales libres. Los copolímeros pueden contener una o más unidades derivadas de acrilamidas, metacrilamidas, acrilamidas de diacetona, ácidos acrílicos o metacrílicos o sus ésteres, vinilactamas tales como vinilpirrolidona o vinilcaprolactama y ésteres vinílicos. Los ejemplos de polímeros incluyen copolímeros de acrilamida y dimetilaminoetil-metacrilato cuaternizados con sulfato de dimetilo o con un haluro de alquilo; copolímeros de acrilamida y cloruro de metacrilato-oxietil-trimetil-amonio; el copolímero de acrilamida y metosulfato de metacrilato-oxietil-trimetilamonio; copolímeros de vinilpirrolidona/dialquilaminoalquil-acrilato o -metacrilato, opcionalmente cuaternizados, tales como los productos comercializados con la denominación GAFQUAT™ por International Specialty Products Inc., Wayne, NJ; los terpolímeros de dimetilaminoetil-metacrilato/vinilcaprolactama/vinilpirrolidona, tales como el producto comercializado con la denominación comercial GAFFIX™ VC 713 por International Specialty Products Inc.; el copolímero vinilpirrolidona/metacrilamidopropil-dimetilamina, comercializado con la denominación comercial STYLEZE™ CC 10 disponible en International Specialty Products Inc.; y los copolímeros de vinilpirrolidona/dimetilaminopropil-metacrilamida cuaternizados tales como el producto comercializado con la denominación comercial GAFQUAT™ HS 100 por International Specialty Products, Inc.

Los agentes catiónicos también se pueden seleccionar entre los polímeros cuaternarios de vinilpirrolidona y de vinilimidazol, tales como los productos comercializados con la denominación comercial Luviquat® (denominación del producto FC 370 y FC 550) de BASF. Otros agentes poliméricos catiónicos que se pueden usar en las composiciones incluyen polialquileniminas tales como polietileniminas, polímeros que contienen unidades de vinilpiridina o de vinilpiridinio, condensados de poliaminas y epiclorhidrininas, polisacáridos cuaternarios, poliuretanos cuaternarios, siliconas cuaternarias y derivados cuaternarios de quitina.

Otros ejemplos no limitantes de compuestos de amonio cuaternario (monoméricos y poliméricos) útiles como agentes catiónicos incluyen cloruro de acetamidopropil-trimonio, behenamidopropil-dimetilamina, etosulfato de behenamidopropil-etildimonio, cloruro de behen-trimonio, etosulfato de cetetil-morfolinio, cloruro de cetrimonio, etosulfato de cocoamidopropil-etildimonio, cloruro de dicetildimonio, cloruro de dimeticona-hidroxiopropil-trimonio, cloruro de hidroxietil-behenamidopropil-dimonio, Quaternium-22, Quaternium-26, Quaternium-27, Quaternium-52, Quaternium-53, Quaternium-63, Quaternium-70, Quaternium-72, Quaternium-76, colágeno hidrolizado, cloruro de PEG-2-cocomonio, cloruro de PPG-9-dietilmonio, cloruro de PPG-25-dietilmonio, cloruro de PPG-40-dietilmonio, cloruro de estearalconio, etosulfato de estearamidopropil-etil-dimonio, proteína de trigo hidrolizada de estearidonio-hidroxiopropilo, colágeno hidrolizado de estearidonio-hidroxiopropilo, cloruro de germamidopropalalconio de trigo, etosulfato de germamidopropil-etildimonio de trigo, Poliquaternium-1, Poliquaternium-4, Poliquaternium-6, Poliquaternium-7, Poliquaternium-10, Poliquaternium-11, Poliquaternium-15, Poliquaternium-16, Poliquaternium-22, Poliquaternium-24, Poliquaternium-28, Poliquaternium-29, Poliquaternium-32, Poliquaternium-33, Poliquaternium-35, Poliquaternium-37, Poliquaternium-39, Poliquaternium-44, Poliquaternium-46, Poliquaternium-47, Poliquaternium-52, Poliquaternium-53, Poliquaternium-55, Poliquaternium-59, Poliquaternium-61, Poliquaternium-64, Poliquaternium-65, Poliquaternium-67, Poliquaternium-69, Poliquaternium-70, Poliquaternium-71, Poliquaternium-72, Poliquaternium-73, Poliquaternium-74, Poliquaternium-76, Poliquaternium-77, Poliquaternium-78, Poliquaternium-79, Poliquaternium-80, Poliquaternium-81, Poliquaternium-82, Poliquaternium-84, Poliquaternium-85, Poliquaternium-87, cloruro de PEG-2-cocomonio; y mezclas de los mismos.

Otros polímeros catiónicos útiles incluyen los poligalactomananos catiónicos (por ejemplo, derivados cuaternizados de guar y casia tales como cloruro de hidroxipropil-trimonio de guar, cloruro de hidroxipropil-trimonio de hidroxipropil-guar y cloruro de hidroxipropil-trimonio de cassia).

Los agentes catiónicos útiles en el presente documento también pueden incluir proteínas y derivados de proteínas, aminos, óxidos de aminos protonadas, betaínas y similares. Los derivados de proteínas incluyen caseína hidrolizada de cocodimonio-hidroxiopropilo, colágeno hidrolizado de cocodimonio-hidroxiopropilo, queratina capilar hidrolizada de cocodimonio-hidroxiopropilo, proteína de arroz hidrolizada de cocodimonio-hidroxiopropilo, seda hidrolizada de cocodimonio-hidroxiopropilo, proteína de soja hidrolizada de cocodimonio-hidroxiopropilo, proteína de trigo hidrolizada de cocodimonio-hidroxiopropilo, aminoácidos de seda hidrolizados de cocodimonio-hidroxiopropilo, colágeno hidrolizado de hidroxipropil-trimonio, queratina hidrolizada de hidroxipropil-trimonio, seda hidrolizada de hidroxipropil-trimonio, salvado de arroz hidrolizado de hidroxipropil-trimonio, proteína de soja hidrolizada de hidroxipropil-trimonio, proteína vegetal hidrolizada de hidroxipropil-trimonio, proteína de trigo hidrolizada de hidroxipropil-trimonio, proteína de trigo hidrolizada, proteína de almendra dulce hidrolizada, proteína de arroz hidrolizada, proteína de soja hidrolizada, proteína de leche hidrolizada, proteína vegetal hidrolizada, queratina hidrolizada, colágeno hidrolizado, gluten de trigo hidrolizado, colágeno hidrolizado de cocoilo potásico, colágeno hidrolizado de hidroxipropil-trimonio, proteína de la leche hidrolizada de cocodimonio-hidroxiopropilo, proteína de trigo hidrolizada de laurildimonio-hidroxiopropilo, colágeno hidrolizado de laurildimonio-hidroxiopropilo, aminoácidos de queratina, aminoácidos de

colágeno, etosulfato de sojaetildimONIO, etosulfato de sojaetil-morfolinio, y similares.

Los compuestos de amonio cuaternario monoméricos incluyen, por ejemplo, sales de alquilbencildimetilamonio, betaínas, sales de amonio heterocíclicas y sales de tetraalquilamonio. Las sales de alquilbencildimetilamonio (graso) de cadena larga se utilizan como acondicionadores, como agentes antiestáticos y como suavizantes de tejidos, que se describen con más detalle a continuación.

Los ejemplos de sales de alquilbencildimetilamonio pueden incluir cloruro de estearalconio, cloruro de benzalconio, Quaternium-63, cloruro de olealconio, cloruro de didecildimONIO y similares. Los compuestos de betaína incluyen las alquilamidopropil-betaínas y de las alquilamidopropil-hidroxisultainas, como se describe en las fórmulas expuestas anteriormente. Los ejemplos no limitantes de compuestos de alquil-betaína incluyen oleil-betaína, cocobetaína, cocoamidopropil-betaína, coco-hidroxi-sultaina, coco/oleamidopropil-betaína, coco-sultaina, cocoamidopropilhidroxisultaina y lauramidopropil-hidroxifostaína de sodio.

Las sales de amonio heterocíclicas incluyen los etosulfatos de alquiletil-morfolinio, etosulfato de isostearil-etilimidonio y los cloruros de alquilpiridinio. Los ejemplos de sales de amonio heterocíclicas no limitantes pueden incluir cloruro de cetilpiridinio, etosulfato de isoesteariletilimidonio, y similares.

Los ejemplos no limitantes de sales de tetraalquilamonio incluyen etosulfato de cocamidopropil-etildimONIO, cloruro de hidroxietil-cetildimONIO, Quaternium-18 y proteína hidrolizada de cocodimONIO-hidroxipropilo tal como la queratina capilar, y similares.

Hay una serie de compuestos de amonio cuaternario que se usan como agentes antiestáticos para el acondicionamiento de tejidos y el cuidado de tejidos. Estos incluyen compuestos de amonio cuaternario alquilados de cadena larga tales como compuestos de dialquildimetilamonio cuaternario, compuestos cuaternarios de imidazolina, compuestos cuaternarios de amidoamina, derivados quat de dialquiléster de compuestos de dihidroxipropilamonio; derivados quat de dialquiléster de compuestos de metiltrietanolamonio, compuestos éster amida amina, y derivados quat de diéster de cloruro de dimetildietanol-amONIO, según lo descrito en el artículo de revisión de Whalley, "Fabric Conditioning Agents," HAPPI, pág. 55-58 (febrero de 1995).

Los ejemplos no limitantes de compuestos de dialquildimetilamonio cuaternario incluyen cloruro de *N,N*-dioleil-*N,N*-dimetilamonio, etosulfato de *N,N*-diseboil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-di(seboil hidrogenado)-*N,N*-dimetilamonio, y similares. Los ejemplos no limitantes de compuestos cuaternarios de imidazolina incluyen cloruro de 1-*N*-metil-3-*N*-seboamidoetilimidazolio, metilsulfato de 3-metil-1-seboilamidoetil-2-seboilimidazolinio, y similares. Los ejemplos no limitantes de compuestos cuaternarios de amidoamina incluyen sales de *N*-alquil-*N*-metil-*N,N*-bis(2-seboamidoetil)amonio donde el grupo alquilo puede ser metilo, etilo, hidroxietilo, y similares. Los ejemplos no limitantes de derivados quat de dialquiléster de compuestos de dihidroxipropilamonio incluyen cloruro de 1,2-diseboiloxi-3-*N,N,N*-trimetil-amoniopropano, cloruro de 1,2-dicanoliloxi-3-*N,N,N*-trimetilamoniopropano, y similares.

Además, otros tipos de compuestos de amonio cuaternario alquilados (por ejemplo, aceite natural y derivados de ácidos grasos) de cadena larga son agentes suavizantes de tejidos adecuados. En un aspecto, los grupos alquilo de cadena larga se obtienen del sebo, aceite de canola o aceite de palma, sin embargo, también son adecuados otros grupos alquilo derivados del aceite de soja y aceite de coco, por ejemplo, como lo son los grupos laurilo, oleilo, ricinoleilo, estearilo y palmitilo. Los compuestos representativos incluyen, pero sin limitación, sales de *N,N*-di(alquiloxi)etil-*N,N*-dimetilamonio tales como cloruro de *N,N*-di(seboiloxi)etil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-di(canoliloxi)etil-*N,N*-dimetilamonio, y similares; sales de *N,N*-di(alquiloxi)etil-*N*-metil-*N*-(2-hidroxi)etil)amonio tales como cloruro de *N,N*-di(seboiloxi)etil-*N*-metil-*N*-(2-hidroxi)etil)amonio, cloruro de *N,N*-di(canoliloxi)etil-*N*-metil-*N*-(2-hidroxi)etil)amonio, y similares; sales de *N,N*-di(2-alquiloxi-2-oxo)etil-*N,N*-dimetilamonio, tales como cloruro de *N,N*-di(2-seboiloxi-2-oxo)etil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-di(2-canoliloxi-2-oxo)etil-*N,N*-dimetilamonio, y similares; sales de *N,N*-di(2-alquiloxi)etilcarboniloxi)etil-*N,N*-dimetilamonio, tales como cloruro de *N,N*-di(2-seboiloxi)etilcarboniloxi)etil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-di(2-canoliloxi)etilcarboniloxi)etil-*N,N*-dimetilamonio, y similares; sales de *N*-(2-alcanoiloxi-2-etil)-*N*-(2-alquiloxi-2-oxo)etil)-*N,N*-dimetilamonio, tales como cloruro de *N*-(2-seboiloxi-2-etil)-*N*-(2-seboiloxi-2-oxo)etil)-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N*-(2-canoliloxi-2-etil)-*N*-(2-canoliloxi-2-oxo)etil)-*N,N*-dimetilamonio, y similares; sales de *N,N,N*-tri(alquiloxi)etil-*N*-metilamonio tales como cloruro de *N,N,N*-tri(seboiloxi)etil-*N*-metilamonio, cloruro de *N,N,N*-tri(canoliloxi)etil-*N*-metilamonio, y similares; sales de *N*-(2-alquiloxi-2-oxo)etil)-*N*-alquil-*N,N*-dimetilamonio, tales como cloruro de *N*-(2-seboiloxi-2-oxo)etil)-*N*-seboil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N*-(2-canoliloxi-2-oxo)etil)-*N*-canolil-*N,N*-dimetilamonio, y similares.

En otro aspecto, los compuestos suavizantes de tejidos de amonio cuaternario incluyen metilsulfato de *N*-metil-*N,N*-bis(seboamidoetil)-*N*-(2-hidroxi)etil)amonio y metilsulfato de *N*-metil-*N,N*-bis(seboamidoetil hidrogenado)-*N*-(2-hidroxi)etil)amonio, derivados quat de dialquiléster de sales de metiltrietanol-amONIO tales como los ésterquats de metosulfato de bis(aciloxi)etil)hidroxietilmetilamonio, y similares; y cloruro de *N,N*-di(seboiloxi)etil-*N,N*-dimetilamonio, donde las cadenas de sebo están al menos parcialmente insaturadas.

En un aspecto adicional, los agentes suavizantes de tejidos incluyen las sales de dialquildimetilamonio bien conocidas, tales como metilsulfato de *N,N*-diseboil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-di(seboil hidrogenado)-*N,N*-

dimetilamonio, cloruro de *N,N*-distearil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-dibehenil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-di(sebo hidrogenado)-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-diseboil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-distearil-*N,N*-dimetilamonio, cloruro de *N,N*-dibehenil-*N,N*-dimetilamonio y cloruro de *N,N*-dimetil-*N*-estearil-*N*-bencilamonio.

- 5 Los compuestos de sal de amonio cuaternario monoméricos y poliméricos anteriores pueden tener cualquier grupo aniónico como un contraión, por ejemplo, cloruro, bromuro, metosulfato de (es decir, metilsulfato), acetato, formiato, sulfato, nitrato y similares.

10 Para las aplicaciones de suavizado de tejidos, se puede utilizar cualquier agente de amonio cuaternario adecuado en combinación con las composiciones acuosas a base de tensioactivo. Para los agentes suavizantes de tejidos que contienen éster, el pH de las composiciones puede influir en la estabilidad de los agentes suavizantes de tejidos, especialmente en condiciones de almacenamiento prolongado. El pH, como se define en el presente contexto, se mide en las composiciones puras a aproximadamente 20 °C. En un aspecto, el pH de la composición es inferior a aproximadamente 6. En otro aspecto, el pH está en el intervalo de 2 a 5, y de 2,5 a 3,5 en un aspecto adicional.

15 En un aspecto, el/los agente/s catiónico/s se puede/n emplear en cantidades que varían del 0,05 % en peso al 15 % en peso, del 0,1 % en peso al 10 % en peso en otro aspecto, y del 0,5 % en peso al 3 % en peso en un aspecto adicional, basándose en el peso de la composición final, pero sin limitación.

20 Conservantes

En un aspecto, en las composiciones ilustrativas, se puede usar cualquier conservante adecuado para su uso en productos para el cuidado personal, cuidado del hogar, cuidado de la salud y cuidado institucional e industrial. Los conservantes adecuados incluyen polimetoxi-biclicoxazolidina, metilparabeno, propilparabeno, etilparabeno, butilparabeno, benciltriazol, DMDM-hidantoína (también conocida como 1,3-dimetil-5,5-dimetilhidantoína), imidazolidinil-urea, fenoxietanol, fenoxietilparabeno, metilisotiazolinona, metilcloroisotiazolinona, benzoisotiazolinona, triclosán, y compuestos de policuaternio adecuados divulgados anteriormente (por ejemplo, Poliquaternium-1).

30 En otro aspecto, los conservantes a base de ácido son útiles en las composiciones ilustrativas. El uso de conservantes a base de ácido facilita la formulación de productos en el intervalo de pH bajo. La reducción del pH de una formulación proporciona inherentemente un entorno inhóspito para el crecimiento microbiano.

35 En las composiciones ilustrativas, se puede usar cualquier conservante a base de ácido que sea útil en los productos para el cuidado personal, cuidado del hogar, cuidado de la salud, y para el cuidado institucional e industrial. En un aspecto el conservante ácido es un compuesto de ácido carboxílico representado por la fórmula: $R^{53}C(O)OH$, donde R^{53} representa hidrógeno, un grupo hidrocarbilo saturado e insaturado que contiene de 1 a 8 átomos de carbono o arilo C_6 a C_{10} . En otro aspecto, R^{53} se selecciona entre un hidrógeno, un grupo alquilo C_1 a C_8 , un grupo alqueno C_2 a C_8 , o fenilo. Los ácidos ilustrativos son ácido fórmico, ácido acético, ácido propiónico, ácido sórbico, ácido caprílico y ácido benzoico, y mezclas de los mismos.

40 En otro aspecto, los ácidos adecuados pueden incluir ácido oxálico, ácido succínico, ácido glutárico, ácido adípico, ácido azelaico, ácido maleico, ácido fumárico, ácido láctico, ácido glicérico, ácido tartrónico, ácido málico, ácido tartárico, ácido glucónico, ácido cítrico, ácido ascórbico, ácido salicílico, ácido ftálico, ácido mandélico, ácido bencílico, y mezclas de los mismos.

45 Las sales de los ácidos anteriores también son útiles siempre que conserven la eficacia a valores bajos de pH. Las sales adecuadas incluyen sales de metales alcalinos (por ejemplo, sodio, potasio, calcio) y sales de amonio de los ácidos enumerados anteriormente.

50 Los conservantes a base de ácido y/o sus sales se pueden usar solos o en combinación con conservantes no ácidos normalmente empleados en los productos para el cuidado personal, cuidado del hogar, cuidado de la salud, y cuidado institucional e industrial.

55 Los conservantes normalmente comprenden del 0,01 % al 3,0 % en peso en un aspecto, del 0,1 % al 1 % en peso en otro aspecto, y del 0,3 % al 1 % en peso en un aspecto adicional, del peso total de las composiciones para el cuidado personal ilustrativas.

60 Los conservantes también pueden servir como agentes antimicrobianos para destruir o inhibir el crecimiento de microorganismos patógenos y de aquellos que son peligrosos para la salud humana que pueden estar presentes en la piel, cuando se usan en cantidades farmacéuticamente eficaces.

Modificador de la reología auxiliar

65 Además del modificador de la reología divulgado en el presente documento, la composición a base de tensioactivos puede contener uno o más modificadores de la reología auxiliares y espesantes. Los modificadores de la reología y espesantes adecuados incluyen modificadores de la reología sintéticos y semisintéticos. Los ejemplos de

modificadores de la reología sintéticos incluyen polímeros y copolímeros de base acrílica. Una clase de modificadores de la reología de base acrílica son los espesantes solubles en álcalis e hinchables en álcalis carboxilo-funcionales (AST) producidos mediante la polimerización por radicales libres de ácido acrílico solo o en combinación con otros monómeros etilénicamente insaturados. Los polímeros se pueden sintetizar por técnicas de disolvente/precipitación, así como técnicas de polimerización en emulsión. Los ejemplos de modificadores de la reología sintéticos de esta clase incluyen homopolímeros de ácido acrílico o ácido metacrílico y copolímeros polimerizados a partir de uno o más monómeros de ácido acrílico, ácido acrílico sustituido, y sales y ésteres de alquilo C₁-C₃₀ de ácido acrílico y ácido acrílico sustituido. Como se define en el presente documento, el ácido acrílico sustituido contiene un sustituyente situado en el átomo de carbono alfa y/o beta de la molécula, donde, en un aspecto, el sustituyente se selecciona independientemente entre alquilo C₁-C₄, -CN y -COOH. Opcionalmente, otros monómeros etilénicamente insaturados tales como, por ejemplo, estireno, acetato de vinilo, etileno, butadieno, acrilonitrilo, así como mezclas de los mismos se pueden copolimerizar en la cadena principal. Los polímeros anteriores están opcionalmente reticulados por un monómero que contiene dos o más fracciones que contienen insaturación etilénica. En un aspecto, el agente de reticulación se selecciona entre un poliéter de polialquenoil que contiene al menos dos grupos de alquenoiléter por molécula. Otros agentes de reticulación ilustrativos se seleccionan entre aliléteres de sacarosa y aliléteres de pentaeritritol, y sus mezclas. Estos polímeros se describen de manera más completa en las patentes de EE.UU. n.º 5.087.445.; 4.509.949; y 2.798.053.

En un aspecto, el AST modificador de la reología o espesante es un homopolímero reticulado polimerizado a partir de ácido acrílico o ácido metacrílico y, en general, se conoce con el nombre INCI de carbómero. Los carbómeros disponibles en el mercado incluyen polímeros Carbopol® 934, 940, 941, 956, 980 y 996 disponibles en Lubrizol Advanced Materials, Inc. En un aspecto adicional, el modificador de la reología se selecciona entre un copolímero reticulado polimerizado a partir de un primer monómero seleccionado entre uno o más monómeros de ácido acrílico, ácido acrílico sustituido, sales de ácido acrílico y sales de ácido acrílico sustituido y un segundo monómero seleccionado entre uno o más ésteres de acrilato de alquilo C₁₀-C₃₀ de ácido acrílico o ácido metacrílico. En un aspecto, los monómeros se pueden polimerizar en presencia de un estabilizador estérico tal como el divulgado en la patente de EE.UU. n.º 5.288.814. Algunos de los polímeros anteriores se designan con la nomenclatura INCI como Polímero reticulado de acrilatos/acrilato de alquilo C₁₀-C₃₀ y están disponibles en el mercado con las denominaciones comerciales Carbopol® 1342 y 1382, Carbopol® Ultrez 20 y 21, Carbopol® ETD 2020 y Pemulen® TR-1 y TR-2 de Lubrizol Advanced Materials, Inc.

En otro aspecto, el modificador de la reología auxiliar puede ser un copolímero de poli(vinilamida/ácido acrílico) lineal, reticulado, como se divulga en la patente de EE.UU. n.º 7.205.271.

Otra clase de modificadores de la reología y espesantes sintéticos opcionales adecuados para su uso en el presente documento incluye los AST modificados hidrófobamente, comúnmente denominados polímeros de emulsión hinchables en álcali y solubles en álcali modificados hidrófobamente (HASE). Los polímeros HASE típicos son polímeros de adición de radicales libres polimerizados a partir de monómeros sensibles al pH o hidrófilos (por ejemplo, ácido acrílico y/o ácido metacrílico), monómeros hidrófobos (por ejemplo, ésteres de alquilo C₁-C₃₀ de ácido acrílico y/o ácido metacrílico, acrilonitrilo, estireno), un "monómero asociativo" y un monómero de reticulación opcional. El monómero asociativo comprende un grupo terminal polimerizable etilénicamente insaturado, una sección media hidrófila no iónica que termina en un grupo terminal hidrófobo. La sección media hidrófila no iónica comprende un grupo polioxilalqueno, por ejemplo, óxido de polietileno, óxido de polipropileno, o mezclas de segmentos de óxido de polietileno/óxido de polipropileno. El grupo extremo hidrófobo terminal normalmente es una fracción alifática C₈-C₄₀. Las fracciones alifáticas ilustrativas se seleccionan entre sustituyentes alquilo lineales y ramificados, sustituyentes alquenoil lineales y ramificados, sustituyentes carbocíclicos, sustituyentes arilo, sustituyentes aralquilo, sustituyentes arilalquilo y sustituyentes alquilarilo. En un aspecto, los monómeros asociativos se pueden preparar mediante la condensación (por ejemplo, esterificación o eterificación) de un alcohol alifático polietoxilado y/o polipropoxilado (que normalmente contiene una fracción alifática C₈-C₄₀ ramificada o no ramificada) con un monómero etilénicamente insaturado que contiene un grupo de ácido carboxílico (por ejemplo, ácido acrílico, ácido metacrílico), un monómero de anhídrido cíclico insaturado (por ejemplo, anhídrido maleico, anhídrido itacónico, anhídrido citracónico), un monoisocianato monoetilénicamente insaturado (por ejemplo, α,α-dimetil-m-isopropenil-bencilisocianato) o un monómero etilénicamente insaturado que contiene un grupo hidroxilo (por ejemplo, alcohol vinílico, alcohol alílico). Los alcoholes alifáticos polietoxilados y/o polipropoxilados son productos de adición de óxido de etileno y/u óxido de propileno de un monoalcohol que contiene la fracción alifática C₈-C₄₀. Los ejemplos no limitantes de alcoholes que contienen una fracción alifática C₈-C₄₀ son alcohol caprílico, alcohol iso-ocitílico (2-etilhexanol), alcohol pelargónico (1-nonanol), alcohol decílico, alcohol laurílico, alcohol miristílico, alcohol cetílico, alcohol cetílico, alcohol cetearílico (mezcla de monoalcoholes C₁₆-C₁₈), alcohol estearílico, alcohol isoestearílico, alcohol elaidílico, alcohol oleílico, alcohol araquidílico, alcohol behenílico, alcohol lignocerílico, alcohol cerílico, alcohol montanílico, melisilo, alcohol lacerílico, alcohol gedílico, y fenoles sustituidos con C₂-C₂₀ (por ejemplo, nonilfenol), y similares.

Los ejemplos de polímeros HASE se divulgan en las patentes de EE.UU. n.º 3.657.175; 4.384.096; 4.464.524; 4.801, 671; y 5.292.843. Además, hay una extensa revisión de polímeros HASE en Gregory D. Shay, Capítulo 25, "Alkali-Swellable and Alkali-Soluble Thickeners: A Review", Polymers in Aqueous Media - Performance Through Association, Advances in Chemistry Series 223, J. Edward Glass (ed.), ACS, pág. 457-494, Division Polymeric

Materials, Washington, DC (1989). Los polímeros HASE disponibles en el mercadp se comercializan con los nombres comerciales, Aculyn® 22 (denominación INCI: Copolímero de Acrilatos/Steareth-20-metacrilato), Aculyn® 44 (denominación INCI: Copolímero de PEG-150/Alcohol decílico/SMD), Aculyn 46® (denominación INCI: Copolímero de PEG-150/Alcohol estearílico/SMDI) y Aculyn® 88 (denominación INCI: Polímero reticulado de Acrilatos/Steareth-20-Metacrilato) de Rohm & Haas, y Novethix™ L-10 (denominación INCI: Copolímero de Acrilatos/Beheneth-25-Metacrilato) de Lubrizol Advanced Materials, Inc.

En otra realización, en el presente documento, se pueden usar polímeros asociativos hinchables en ácido. Dichos polímeros, en general, tienen características catiónicas y asociativas. Estos polímeros son polímeros de adición de radicales libres polimerizados a partir de una mezcla de monómeros que comprende un monómero hidrófilo sustituido con amino sensible a los ácidos (por ejemplo, alquil(met)acrilatos o (met)acrilamidas de dialquilamino, un monómero asociativo (definido anteriormente), un (met)acrilato de alquilo inferior u otros comonómeros polimerizables por radicales libres seleccionados entre hidroxialquilésteres de ácido (met)acrílico, viniléteres y/o aliléteres de polietilenglicol, viniléteres y/o aliléteres de polipropilenglicol, viniléteres y/o aliléteres de polietilenglicol/polipropilenglicol, polietilenglicolésteres de ácido (met)acrílico, polipropilenglicolésteres de ácido (met)acrílico, polietilenglicol/polipropilenglicolésteres de ácido (met)acrílico) y sus combinaciones. Estos polímeros pueden estar opcionalmente reticulados. Sensible a los ácidos pretende significar que el sustituyente amino se convierte en catiónico a valores de pH bajos, por lo general, que varían de 0,5 a 6,5. Los polímeros asociativos hinchables en ácidos ilustrativos están disponibles en el mercado con la denominación comercial Structure® Plus (Denominación INCI: Acrilatos/Aminoacrilatos/PEG-20-itaconato de alquilo C₁₀-C₃₀) de Akzo Nobel y Carbopol® Aqua CC (Denominación INCI: Polímero reticulado de Poli(acrilatos-1) de Lubrizol Advanced Materials, Inc. En un aspecto, el polímero hinchable en ácido es un copolímero de uno o más ésteres de alquilo C₁-C₅ de ácido (met)acrílico, metacrilato de dialquilamino C₁-C₄-alquilo C₁-C₆, PEG/PPG-30/5 aliléter, metacrilato de PEG 20-25-alquil C₁₀-C₃₀-éter, metacrilato de hidroxialquilo C₂-C₆ reticulado con dimetacrilato de etilenglicol. Otros polímeros asociativos hinchables en ácidos útiles se divulgan en la patente de EE.UU. n.º 7.378.479.

El metilglucósido alcoxilado modificado hidrófobamente tal como, por ejemplo, PEG-120-metil-glucosa-dioleato, PEG-120-metil-glucosa-trioleato y PEG-20-metil-glucosa-sesquiestearato, disponibles en Lubrizol Advanced Materials, Inc., con las denominaciones comerciales, Glucamato® DOE-120, Glucamato™ LT y Glucamato™ SSE-20, respectivamente, también son adecuados como modificadores de la reología auxiliares.

También se pueden emplear en las composiciones del presente documento los polisacáridos obtenidos de exudados de árboles y arbustos, tales como goma arábiga, goma de gahatti y goma de tragacanto, así como pectina; extractos de algas marinas tales como alginatos y carragenanos (por ejemplo, lambda, kappa, iota y sales de los mismos); extractos de algas tales como agar; polisacáridos microbianos tales como xantano, gelano y Wellan; éteres de celulosa tales como etilhexilcelulosa, hidroxibutilmetilcelulosa, hidroxietilmetilcelulosa, hidroxipropil-metilcelulosa, metilcelulosa, carboximetilcelulosa, hidroxietilcelulosa e hidroxipropilcelulosa; poligalactomananos tales como goma de alholva, goma cassia, goma de algarrobo, goma de tara y goma de guar; almidones tales como almidón de maíz, almidón de tapioca, almidón de arroz, almidón de trigo, almidón de patata y almidón de sorgo como espesantes y modificadores de la reología auxiliares adecuados.

En the International Cosmetic Ingredient Dictionary and Handbook (T. Gottschalk y H. P. Breslawec, "International Cosmetic Ingredient Dictionary and Handbook", páginas 3974-3977, 14ª Ed, Personal Care Products Council Publisher, Washington, DC, EE.UU. (2012)), se puede encontrar una lista completa de productos químicos espesantes, aportadores de viscosidad o modificadores de la reología.

Los modificadores de la reología auxiliares, cuando se emplean, se pueden usar solos o en combinación, y normalmente se usan en una cantidad que varía del 0,1 % en peso al 8 % en peso en un aspecto, del 0,3 % en peso al 3 % en peso en otro aspecto, y del 0,5 % en peso al 2 % en peso de la composición para el cuidado personal.

En un aspecto, la composición acuosa a base de tensioactivos contiene no más de un total del 0,1 % en peso de todos los modificadores de la reología distintos del modificador de la reología ilustrativo.

Emulsionantes

Los emulsionantes que se pueden emplear en las composiciones ilustrativas incluyen alcoholes grasos C₁₂-C₂₂, alcoholes alcoxilados C₁₂-C₂₂, ácidos grasos C₁₂-C₂₂, ácidos grasos C₁₂-C₂₂ alcoxilados (los alcoxilatos que tienen cada uno de 10 a 80 unidades de óxido de etileno, óxido de propileno y combinaciones de óxido de etileno/óxido de propileno presentes en la molécula), APG C₈-C₂₂, esteroides etoxilados (donde el número de unidades de óxido de etileno varía de 2 a aproximadamente 150), ésteres parciales de poliglicerol, ésteres y ésteres parciales de polioles que tienen de 2 a 6 átomos de carbono, ésteres parciales de poliglicerol y organosiloxanos, y combinaciones de los mismos.

Los emulsionantes de APG de alquilo C₈-C₂₂ se preparan mediante la reacción de la glucosa o de un oligosacárido con alcoholes grasos primarios que tienen de 8 a 22 átomos de carbono, y comprenden un grupo alquilo C₈-C₁₆ unido glucosídicamente en un resto de oligoglucósido, cuyo grado medio de oligomerización es de 1 a 2. Además de

los APG descritos como tensioactivos anteriores, los APG están disponibles con la marca comercial Plantacare® (Cognis Corporation, Cincinnati, OH). Los glucósidos y oligoglucósidos de alquilo ilustrativos se seleccionan entre glucósido de octilo, glucósido de decilo, glucósido de laurilo, glucósido de palmitilo, glucósido de isoestearilo, glucósido de estearilo, glucósido de araquidilo y glucósido de behenilo, y mezclas de los mismos.

Los emulsionantes a base de los ésteres y ésteres parciales de polioles que tienen de 2 a 6 átomos de carbono que se condensan con ácidos grasos lineales saturados e insaturados que tienen de 12 a 30 átomos de carbono son, por ejemplo, los monoésteres y diésteres de glicerol o etilenglicol, o los monoésteres de propilenglicol con ácidos grasos C₁₂-C₃₀ saturados e insaturados.

Los alcoholes grasos y ácidos grasos ilustrativos, así como sus alcoxilatos, los ésteres parciales de poligliceroles, así como los organosiloxanos se han descrito anteriormente.

Agentes quelantes

Los agentes quelantes se pueden emplear para estabilizar las composiciones para el cuidado personal, cuidado del hogar, cuidado de la salud y cuidado institucional divulgadas en el presente documento contra los efectos nocivos de los iones metálicos. Cuando se utilizan, los agentes quelantes adecuados incluyen EDTA (ácido etilendiaminotetraacético) y sales de los mismos tales como EDTA disódico, ácido cítrico y sales de los mismos, ciclodextrinas, y similares, y mezclas de los mismos. Dichos agentes quelantes adecuados normalmente comprenden del 0,001 % al 3 % en peso, por ejemplo, del 0,01 % en peso al 2 % en peso, o del 0,01 % en peso al 1 % en peso de la composición.

Disolventes y diluyentes auxiliares

Las composiciones para el cuidado personal, cuidado del hogar, cuidado de la salud y cuidado institucional que contienen las composiciones tensioactivas espesadas en combinación con uno o más de los principios activos anteriores y/o con uno o más aditivos y/o adyuvantes, incluidos convencional o popularmente en los productos para el cuidado personal, cuidado de la salud, cuidado del hogar y cuidado institucional descritos anteriormente se pueden preparar como formulaciones a base de agua, y formulaciones que contienen disolventes y/o diluyentes auxiliares hidromiscibles, pero no se limitan a los mismos.

Los disolventes útiles empleados comúnmente, normalmente, son líquidos tales como alcoholes, alcoholes grasos, polioles y similares, y mezclas de los mismos. Los disolventes auxiliares no acuosos o hidrófobos se emplean comúnmente en productos esencialmente exentos de agua, tales como lacas de uñas, aerosoles propulsores, o para funciones específicas tales como la eliminación de manchas aceitosas, sebo, maquillaje, o para disolver colorantes, fragancias y similares, o se incorporan en la fase oleosa de una emulsión. Los ejemplos no limitantes de disolventes auxiliares, distintos del agua, incluyen alcoholes lineales y ramificados tales como etanol, propanol, isopropanol, hexanol y similares; alcoholes aromáticos tales como alcohol bencílico, ciclohexanol y similares; alcohol graso C₁₂-C₃₀ saturado tal como alcohol laurílico, alcohol miristílico, alcohol cetílico, alcohol estearílico, alcohol behenílico y similares. Los ejemplos no limitantes de polioles incluyen alcoholes polihidroxilados tales como glicerina, propilenglicol, butilenglicol, hexilenglicol, alcoholes C₂-C₄ alcoxilados y polioles C₂-C₄ alcoxilados tales como éteres etoxilados, propoxilados y butoxilados de alcoholes, dioles y polioles que tienen de 30 átomos de carbono y de 40 unidades alcoxi, polipropilenglicol, polibutilenglicol y similares. Los ejemplos no limitantes de disolventes o diluyentes auxiliares no acuosos incluyen siliconas y derivados de silicona, tales como ciclometicona, y similares, cetonas tales como acetona y metiletilcetona; aceites y ceras naturales y sintéticos tales como aceites vegetales, aceites de plantas, aceites animales, aceites esenciales, aceites minerales, isoparafinas C₇-C₄₀, ésteres alquilcarboxílicos tales como acetato de etilo, acetato de amilo, lactato de etilo y similares, aceite de jojoba, aceite de hígado de tiburón, y similares. Algunos de los disolventes o diluyentes auxiliares no acuosos anteriores también pueden ser acondicionadores y emulsionantes.

Los disolventes orgánicos ilustrativos incluyen los enumerados anteriormente, así como los mono-alcoholes que tienen de 2 a 5 átomos de carbono por molécula, tales como etanol. El disolvente orgánico puede estar presente a una concentración del 0,01 % en peso al 20 % en peso, por ejemplo, hasta el 10 % en peso, tal como hasta el 5 % en peso, y en una realización, no superior al 1 % en peso.

Propulsores

Cuando se desee, se puede utilizar cualquier propulsor de aerosol conocido para la administración de las composiciones para el cuidado personal, cuidado del hogar, cuidado de la salud y cuidado institucional ilustrativas en combinación con uno o más de los anteriores principios activos y/o con el uno o más aditivos y/o adyuvantes, convencional o popularmente incluidos en este tipo de productos. Los propulsores ilustrativos pueden incluir hidrocarburos de punto de ebullición inferior tales como hidrocarburos C₃-C₆ de cadena lineal o ramificada. Los propulsores de hidrocarburos ilustrativos incluyen propano, butano, isobuteno, y mezclas de los mismos. Otros propulsores adecuados incluyen éteres tales como dimetiléter, hidrofluorocarbonos tales como 1,1-difluoroetano y gases comprimidos tales como aire y dióxido de carbono.

En un aspecto, estas composiciones pueden contener del 0,1 % en peso al 60 % en peso de un propulsor, o del 0,5 al 35 % en peso.

COMPOSICIONES ILUSTRATIVAS

5 Los ésteres de glucósido ilustrativos tales como los ésteres de MeG tienen una variedad de aplicaciones de uso final tales como, por ejemplo, aplicaciones de cuidado personal. Las aplicaciones de cuidado personal típicas incluyen, por ejemplo, composiciones farmacéuticas y cosméticas tales como, por ejemplo, champús, acondicionadores, pomadas, cremas para la piel, lociones, jabones, y similares. Las aplicaciones típicas para uso doméstico incluyen, por ejemplo, el uso como reguladores de la viscosidad para el manejo general de fluidos y para aplicaciones de tensioactivos tales como líquidos para lavavajillas, detergentes para ropa y similares.

15 Los espesantes ilustrativos se introducen en las composiciones tensioactivas líquidas en forma líquida o como una pasta, y se mezclan en condiciones eficaces para disolver el espesante en la composición tensioactiva líquida y provocar aumentos de viscosidad significativos, por ejemplo, de hasta 2.000 a 100.000 mPa·s. La capacidad para introducir el espesante en una forma líquida puede proporcionar al formulador un mayor grado de precisión en la introducción de la cantidad correcta de espesante en el sistema tensioactivo líquido y también facilita el procesamiento automatizado. Los espesantes se pueden usar para preparar formulaciones tensioactivas, por ejemplo, champús, a temperatura ambiente, por ejemplo, de aproximadamente 20 a 30 °C (conocido en la técnica como "procesamiento en frío"). Se pueden añadir a las formulaciones en cualquier etapa del proceso para ajustar su viscosidad como se desee. Los ésteres de glucósido también se pueden añadir a la composición tensioactiva a temperaturas elevadas, a través del "procesamiento en caliente", según sea necesario para fundir las ceras, los agentes nacarados y otros adyuvantes de formulación de alto punto de fusión.

25 Las composiciones que contienen el modificador de la reología ilustrativo se pueden envasar y dispensar desde recipientes tales como frascos, tubos, pulverizadores, toallitas, *roll-ons*, varillas y similares, sin limitación. No hay ninguna limitación en cuanto a la forma del producto en la que el modificador de la reología se puede incorporar, siempre que se consiga la finalidad para la que se usa el producto. Por ejemplo, los productos de cuidado personal que contienen el modificador de la reología ilustrativo se pueden aplicar a la piel, el cabello, el cuero cabelludo y las uñas, sin limitación en forma de geles, pulverizaciones (líquidos o espumas), emulsiones (cremas, lociones, pastas), líquidos (enjuagues, champús), barras, pomadas, y similares.

35 Los usos ilustrativos incluyen productos para cuidado del cabello (champús, champús combinados tales como champús acondicionadores "dos en uno"), enjuagues para después del champú, agentes fijadores del peinado (incluidos los coadyuvantes de fijación tales como geles y aerosoles, productos de aseo tales como pomadas, acondicionadores, permanentes, relajantes, productos alisadores del cabello y similares), productos para el cuidado de la piel (facial, corporal, manos, cuero cabelludo y pies), tales como cremas, lociones y productos de limpieza, productos contra el acné, productos antienvjecimiento (exfoliante, queratolítico, anticelulítico, anti-arrugas y similares), protectores de la piel (productos de protección solar tales como filtros solares, protector solar, cremas barrera, aceites, siliconas y similares), productos de color para la piel (blanqueadores, aclarantes, aceleradores del bronceado sin sol y similares), colorantes para el cabello (tintes para el cabello, aclarados de color para el cabello, mechas, blanqueadores y similares), colorantes para la piel pigmentados (maquillajes para cara y cuerpo, fondos de maquillaje, rímel, colorete, productos para los labios, y similares), productos de baño y ducha (limpiadores corporales, jabón corporal, gel de ducha, jabón líquido, barras de jabón, pastillas sintéticas, aceite acondicionador líquido de baño, baño de burbujas, polvos de baño, y similares), productos para el cuidado de las uñas (betunes, quitaesmaltes, agentes reforzantes, alargadores, endurecedores, removedores de cutícula, suavizantes, y similares).

50 Los artículos de tocador y los productos de belleza que contienen el modificador de la reología divulgado en el presente documento pueden incluir, sin limitación, productos de depilación (cremas y lociones de afeitar, cremas depiladoras, acondicionador de la piel para después del afeitado, y similares), productos potenciadores del crecimiento capilar, desodorantes y antitranspirantes, productos de cuidado oral (boca, dientes, encías) tales como enjuague bucal, dentífrico tal como pasta de dientes, polvo dental, productos para pulir los dientes, blanqueadores dentales y refrescantes bucales, adhesivos para dentaduras postizas, y similares; decolorantes del vello facial y corporal y similares. Otros productos de belleza que pueden contener el modificador de la reología pueden incluir aplicaciones de bronceado sin sol que contienen aceleradores del bronceado artificial, tales como dihidroxiacetona (DHA), tirosina, ésteres de tirosina y similares; despigmentantes, blanqueadores e iluminadores de la piel, formulaciones que contienen principios activos tales como ácido kójico, hidroquinona, arbutina, frutal, extractos vegetales o de plantas (extracto de cáscara de limón, manzanilla, té verde, extracto de morera de papel y similares), derivados del ácido ascorbílico palmitato de ascorbilo, estearato de ascorbilo, fosfato de ascorbilo magnésico y similares).

60

Jabón corporal ilustrativo

En un aspecto, una composición para el cuidado personal donde el modificador de la reología ilustrativo es útil es un jabón corporal. Los componentes típicos de un jabón corporal, además del modificador de la reología y el agua, incluyen al menos un tensioactivo, un agente de ajuste del pH (base y/o ácido) en cantidad suficiente para proporcionar a la composición un pH de aproximadamente 3,0 a aproximadamente 7,5 en un aspecto, de aproximadamente 4,0 a aproximadamente 6,5, en otro aspecto, y de aproximadamente 5,0 a aproximadamente 6,0 en un aspecto adicional. También se pueden incorporar ingredientes opcionales seleccionados de los aditivos citados anteriormente, y mezclas de los mismos tales como, por ejemplo, siliconas, agentes nacarados, vitaminas, aceites, fragancias, colorantes, conservantes incluyendo ácidos, productos botánicos, agentes exfoliantes, burbujas de gas insolubles, liposomas, microesponjas, perlas y escamas cosméticas, y sus mezclas. En un aspecto, el tensioactivo es un tensioactivo aniónico. En otro aspecto, el tensioactivo es una mezcla de un tensioactivo aniónico y un tensioactivo anfótero, en combinación opcional con un tensioactivo no iónico. En otro aspecto, el tensioactivo es una mezcla de un tensioactivo aniónico y un tensioactivo anfótero, en combinación opcional con un tensioactivo catiónico y/o no iónico. En un aspecto, el tensioactivo aniónico puede estar presente en una cantidad que varía del aproximadamente 5 % al aproximadamente 40 % en peso, del aproximadamente 6 % al aproximadamente 30 % en peso en otro aspecto, y del 8 % al aproximadamente 25 % en peso en un aspecto adicional, basado en el peso total de la composición de jabón corporal. Cuando se usan mezclas de tensioactivos aniónicos y anfóteros, la proporción de tensioactivo anfótero:tensioactivo aniónico puede variar de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 15:1, en un aspecto, de aproximadamente 1,5:1 a aproximadamente 10:1 en otro aspecto, de aproximadamente 2,25:1 a aproximadamente 9:1 en un aspecto adicional, y de aproximadamente 4,5:1 a aproximadamente 7:1 en un aspecto adicional más. La cantidad del modificador de la reología puede variar del aproximadamente 0,5 % en peso al aproximadamente 5 % en peso en un aspecto, o del aproximadamente 1 % en peso al aproximadamente 3 % en peso de la composición de jabón corporal.

El jabón corporal se puede formular como jabones corporales hidratantes, jabones corporales antibacterianos, geles de baño, geles de ducha, jabones líquidos para las manos, exfoliantes corporales; baños de burbujas, exfoliantes faciales, exfoliantes para los pies, y similares.

Composiciones de champú ilustrativas

En un aspecto, una composición para el cuidado personal donde el modificador de la reología es útil es un champú. Los componentes típicos de un champú, además del modificador de la reología y del agua, incluyen al menos un tensioactivo, un agente de ajuste del pH (base y/o ácido) en cantidad suficiente para proporcionar un pH de aproximadamente 3,0 a aproximadamente 10 en un aspecto, y de aproximadamente 3,0 a aproximadamente 7,5, en otro aspecto; y los ingredientes opcionales seleccionados entre los aditivos citados anteriormente, y mezclas de los mismos tales como agentes acondicionadores (por ejemplo, siliconas y/o agentes acondicionadores catiónicos, siliconas de tamaño de partícula pequeño y/o grande), agentes nacarados, vitaminas, aceites, fragancias, colorantes, conservantes incluyendo ácidos, productos botánicos y burbujas de gas insolubles, liposomas, y perlas y escamas cosméticas, y agentes anti-caspa, y sus mezclas. En un aspecto, el tensioactivo es un tensioactivo aniónico. En otro aspecto, el tensioactivo es una mezcla de un tensioactivo aniónico y un tensioactivo anfótero, en combinación opcional con un tensioactivo catiónico y/o un tensioactivo no iónico. En un aspecto, el tensioactivo aniónico puede estar presente en una cantidad que varía del aproximadamente 5 % en peso al aproximadamente 40 % en peso, o del aproximadamente 6 % en peso al aproximadamente 30 % en peso, o del 8 % en peso al aproximadamente 25 % en peso del peso total de la composición de champú. Cuando se usan mezclas de tensioactivos aniónicos y anfóteros, la proporción de tensioactivo aniónico con respecto al tensioactivo anfótero puede variar de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 10:1 en un aspecto, de aproximadamente 2,25:1 a aproximadamente 9:1 en otro aspecto, y de aproximadamente 4,5:1 a aproximadamente 7:1 en un aspecto adicional. La cantidad del modificador de la reología ilustrativo puede variar del aproximadamente 0,5 % en peso al aproximadamente 5 % en peso en un aspecto, o del aproximadamente 1 % en peso al aproximadamente 3 % en peso en otro aspecto, y del aproximadamente 1,5 % en peso al aproximadamente 2,5 % en peso en un aspecto adicional, basado en el peso total de la composición de champú.

Las realizaciones de champú se pueden formular como champús 2 en 1, champús para bebés, champús acondicionadores, champús para dar cuerpo, champús hidratantes, champús de coloración temporal del cabello, champús 3 en 1, champús anticaspa, champús de mantenimiento del color capilar, champús (neutralizantes) de ácidos, champús medicados, y champús de ácido salicílico, y similares.

Limpiadores basados en jabones de ácidos grasos líquidos ilustrativos

En un aspecto, una composición para el cuidado personal donde el modificador de la reología ilustrativo es útil es un limpiador a base de jabón de ácido graso. Los componentes típicos de un limpiador de jabón a base de ácidos grasos, además del modificador de la reología ilustrativo incluyen al menos una sal de ácido graso, un tensioactivo opcional o una mezcla de tensioactivos, un agente de ajuste del pH (base y/o ácido) en cantidad suficiente para proporcionar un pH superior a 7 en un aspecto, de aproximadamente 7,5 a aproximadamente 14 en otro aspecto, de aproximadamente 8 a aproximadamente 13 en otro aspecto más, y los ingredientes opcionales seleccionados entre

los aditivos descritos anteriormente, y las mezclas de los mismos, incluyendo los aditivos seleccionados entre siliconas, humectantes, agentes nacarados, vitaminas, aceites, fragancias, colorantes, conservantes, productos botánicos, agentes anticasca, agentes exfoliantes, burbujas de gas insolubles, liposomas, microesponjas, perlas y escamas cosméticas.

5 En un aspecto, los jabones de ácidos grasos se seleccionan entre al menos una sal de ácido graso (por ejemplo, sal de sodio, potasio o amonio) que contiene de aproximadamente 8 a aproximadamente 22 átomos de carbono. En otro aspecto, la composición de jabón líquido contiene al menos una sal de ácido graso que contiene de aproximadamente 12 a aproximadamente 18 átomos de carbono. Los ácidos grasos utilizados en los jabones
10 pueden estar saturados y/o insaturados, y se pueden derivar de fuentes sintéticas, así como de la saponificación de grasas y de aceites naturales mediante una base adecuada (por ejemplo, hidróxidos de sodio, potasio y amonio). Los ácidos grasos saturados ilustrativos incluyen octanoico, decanoico, láurico, mirístico, pentadecanoico, palmítico, margárico, estérico, isoesteárico, nonadecanoico, araquídico, behénico y similares, y mezclas de los mismos. Los ácidos grasos insaturados ilustrativos incluyen las sales (por ejemplo, sodio, potasio, amonio) de miristoleico,
15 palmitoleico, oleico, linoleico, linoléico, y similares, y las mezclas de los mismos. Los ácidos grasos se pueden derivar de grasas animales tales como sebo o de aceite vegetal tal como aceite de coco, aceite de color rojo, aceite de almendra de palma, aceite de palma, aceite de semilla de algodón, aceite de oliva, aceite de soja, aceite de cacahuete, aceite de maíz, y mezclas de los mismos. La cantidad de jabón de ácido graso que se puede emplear en las composiciones limpiadoras líquidas de dicha realización varía del aproximadamente 1 % en peso al
20 aproximadamente 50 % en peso en un aspecto, o del aproximadamente 10 % en peso al aproximadamente 35 % en peso, o del aproximadamente 12 % en peso al 25 % en peso de la composición total.

Un tensioactivo aniónico opcional puede estar presente en la composición de jabón en una cantidad que varía del aproximadamente 1 % en peso al aproximadamente 25 % en peso en un aspecto, o del aproximadamente 5 % en peso al aproximadamente 20 % en peso, o del 8 % en peso al aproximadamente 15 % en peso, basado en el peso total de la composición de jabón. Se pueden usar mezclas de tensioactivos aniónicos y anfóteros. La proporción de tensioactivo aniónico con respecto al tensioactivo anfótero puede variar de aproximadamente 1:1 a aproximadamente 10:1 en un aspecto, o de aproximadamente 2,25:1 a aproximadamente 9:1, o de aproximadamente 4,5:1 a aproximadamente 7:1.

30 La cantidad del modificador de la reología ilustrativo en la composición de jabón líquido puede variar del aproximadamente 0,5 % en peso al aproximadamente 5 % en peso, o del aproximadamente 1 % en peso al aproximadamente 3 % en peso, o del aproximadamente 1,5 % en peso al aproximadamente 2,5 % en peso, basado en el peso total de la composición de jabón.

35 Las realizaciones de los limpiadores a base de jabón de ácido graso líquidos ilustrativos pueden formularse como jabones corporales, geles de baño, geles de ducha, jabones líquidos para las manos, exfoliantes corporales; baños de burbujas, exfoliantes faciales y exfoliantes para los pies, champús 2 en 1, champús para bebés, champús acondicionadores, champús para dar cuerpo, champús hidratantes, champús de coloración temporal del cabello,
40 champús 3 en 1, champús anticasca, champús de mantenimiento del color capilar, champús (neutralizantes) de ácidos, champús anticasca, champús medicados y champús de ácido salicílico, y similares.

45 Sin pretender limitar el alcance de la realización ilustrativa, los siguientes ejemplos demuestran métodos de preparación del modificador de la reología ilustrativo y la eficacia del modificador de la reología como espesante en una composición acuosa a base de tensioactivo.

Ejemplos

Materiales

50 El metilglucósido (MeG) fue suministrado por Lubrizol Corp, Cleveland, Ohio, EE.UU., en una formulación activa al 60 % en peso con una pureza de la forma de monosacárido superior al 95 % en peso.

55 Se obtuvo una mezcla aproximadamente equimolar de metilésteres de caprilato y caprato (CC) en P & G con la denominación comercial CE-810 (C₈ al 50-58 %, C₁₀ al 34-50 %, <2 % de otros).

Se obtuvo un éster de oleato de metilo (O) de origen vegetal, una mezcla de ésteres grasos de metilo C₁₃-C₂₂ de cadena larga, predominantemente C₁₈ (C₁₈ a > 75 %) en PMC Group con la denominación comercial Kemester 205.

60 Los siguientes tensioactivos fueron suministrados por Lubrizol Advanced Materials, Inc., Cleveland, Ohio, EE.UU.: laureth-sulfato de sodio con 2 moles de etoxilación (SLES2EO); cocamidopropil-betaína (CAPB), con la denominación comercial de Chembetaine CAD; laurilsulfato de sodio (SLS), un tensioactivo aniónico; cocobetaína, un tensioactivo zwitteriónico, cocamidopropil-betaína, cocoanfoacetato de sodio (SCAA), lauril-sulfosuccinato disódico (DSLSS).

65 El sulfonato de olefina C₁₄-C₁₆ sódico (SOS) con la denominación comercial Bio-Terge® AS-40 CG, que contiene

aproximadamente el 39 % de principios activos, se obtuvo de Stepan Products.

La sal de alfa-sulfometil C₁₂-C₁₈-éster de sodio y ácido graso (AOS), que contiene el 47 % de sólidos (aproximadamente el 38 % de principios activos, predominantemente metil-2-sulfolaurato sódico y 2-sulfolaurato disódico), con el denominación comercial Alpha-Step® MC-48 se obtuvo en Stepan Products.

En las proporciones en peso de los tensioactivos que figuran a continuación, se considera el peso del respectivo principio activo.

10 Métodos de ensayo

A menos que se indique, la medición de todas las propiedades de las formulaciones ilustrativas se realizó en formulaciones envejecidas a temperatura ambiente durante 24 horas.

15 La viscosidad (en MPa·s) se mide con un viscosímetro DV-II + Pro de Brookfield (Brookfield Engineering Laboratories, Inc.) y el husillo SC421/13R, que gira a 20 rpm; a 20 °C ± 1 °C, de acuerdo con el Manual de Brookfield Engineering M/98-161-1496.

20 La turbidez de las soluciones se mide usando un turbidímetro Micro100 (o con el turbidímetro Micro100), HF Scientific Inc., EE.UU. La turbidez se registra en Unidades de Turbidez Nefelométricas, UTN.

El pH de las composiciones se mide en condiciones ambiente usando un medidor de pH convencional calibrado con patrones de pH 4, 7 y 10.

25 Los espectros de RMN de ¹H se obtuvieron en piridina-D₅ a la temperatura ambiente en un espectrómetro de RMN AV-500 de Bruker funcionando a 500,13 MHz para la detección de protones. Se usa un ancho de pulso de 30 grados para la excitación con una frecuencia de repetición de 3,93 segundos. En general, se adquieren 64 exploraciones. Las soluciones de muestra se realizan a una concentración de 25 a 50 mg/0,5 ml.

30 1. PREPARACIÓN DE ÉSTERES ILUSTRATIVOS

Ejemplo A - Preparación de metilglucosa-caprilato/caprato/oleato (MeG-CCO)

35 Se carga un matraz de fondo redondo y 4 bocas, de 250 ml, dotado de un agitador mecánico, un termómetro, una entrada de nitrógeno y una trampa de Dean Stark con un condensador vertical en la parte superior con 100 gramos de metilglucósido (solución acuosa al 60 % en peso), 50 gramos de metil-caprilato/caprato, 30 gramos de metil-oleato de origen vegetal (como se ha descrito anteriormente, denominado en el presente documento simplemente metil-oleato) y 0,5 gramos de carbonato de sodio (ceniza de sosa). Se agita la mezcla y se calienta en atmósfera de nitrógeno hasta 105 °C, y se recoge el destilado en la trampa Dean Stark. Se continúa el calentamiento. Se drena la
40 capa inferior que contiene agua y metanol de la trampa Dean Stark para eliminarlos, mientras se vuelve a llevar la capa superior que contiene principalmente metil-caprilato/caprato a la mezcla de reacción. La reacción se mantiene a 160 °C durante 24 horas, hasta que el metil-oleato es inferior al 0,5 % en peso y el metil-caprilato/caprato es inferior al 0,5 % en peso, como se determina por cromatografía de gases (GC). Se retira el vacío a < 5,0 mm Hg y se mantiene durante 2 horas a 160 °C para destilar el metil-caprilato/caprato y metil-oleato sin reaccionar. Se enfría el
45 líquido viscoso restante hasta 80 °C y se filtra a través de una bolsa de 100 micrómetros. La RMN de H (disolvente: piridina-d₅) revela el grado total de esterificación como 1,01 (0,63 eq de MeG-caprilato/caprato y 0,38 equivalentes de MeG-oleato). Se desecha el destilado recogido en la trampa Dean Stark incluyendo 12 ml de capa orgánica superior.

50 EJEMPLOS B-G: Preparación de metilglucosa-caprilato/caprato/oleato (MeG-CCO)

Los productos se sintetizan mediante el método descrito para el Ejemplo A anterior, con las cargas de materias primas de acuerdo con la Tabla 1. Los resultados de RMN de H se enumeran en la Tabla 2.

55 EJEMPLO H: Preparación de metilglucosa-caprilato/caprato/laurato (MeG-CCL)

El producto se sintetiza mediante el método descrito para el Ejemplo A anterior, con las cargas de materias primas de acuerdo con la Tabla 1. Los resultados de RMN de H se enumeran en la Tabla 2. El grado total de esterificación es de 1,02, pero los equivalentes de MeG-caprilato/caprato y MeG-laurato eran difíciles de distinguir.

60

EJEMPLO I: Preparación de metilglucosa-laurato/oleato (MeG-LO)

El producto se sintetiza mediante el método descrito para el Ejemplo A anterior, con las cargas de materias primas de acuerdo con la Tabla 1. Los resultados de RMN de H se enumeran en la Tabla 2.

65

EJEMPLO J: Preparación de metilglucosa-caprilato/caprato (MeG-CC)

El producto se sintetiza mediante el método descrito para el Ejemplo A anterior, con las cargas de materias primas de acuerdo con la Tabla 1. Los resultados de RMN de H se enumeran en la Tabla 2.

5

EJEMPLOS K y L: Preparación de metil glucosa-laurato (MeG-L)

El metilglucosa-laurato se sintetiza mediante el método descrito para el Ejemplo A anterior, con las cargas de materias primas de acuerdo con la Tabla 1. Los resultados de RMN de H se enumeran en la Tabla 2.

10

EJEMPLO M: Preparación de metilglucosa-Oleato (MeG-O)

La metilglucosa-oleato se sintetiza mediante el método descrito para el Ejemplo A anterior con las cargas de materias primas de acuerdo con la Tabla 1. Los resultados de RMN de H se enumeran en la Tabla 2.

15

EJEMPLO N: Preparación de metilglucosa-Isoestearato (MeG-I)

El metilglucosa-isoestearato se sintetiza mediante el método descrito para el Ejemplo A anterior con las cargas de materias primas de acuerdo con la Tabla 1. Los resultados de RMN de H se enumeran en la Tabla 2.

20

TABLA 1: Formulaciones para los ésteres ilustrativos

Producto		Materia prima cargada, g				
EJ.	Denominación	MeG (60 %)	Metil-CC	Metil-laurato	Metil-isoestearato	Metil-oleato
A	MeG-CCO	100	50			30
B	MeG-CCO	200	90			50
C	MeG-CCO	200	100			60
D	MeG-CCO	200	74			58
E	MeG-CCO	200	94			29
F	MeG-CCO	200	102			14
G	MeG-CCO	400	148			116
H	MeG-CCL	200	53	66		
I*	MeG-LO	200		90		56
J*	MeG-CC	200	120			
K*	MeG-L	400		300		
L*	MeG-L	200		150		
M*	MeG-O	360				334
N	MeG I	60			60	
O	MeG-CCO	200	82			50
P	MeG-CCO	180	83			65
Q	MeG-CCO	165	91			72
R*	MeG-L	225		175		
*Comparativo						

La Tabla 2 muestra los productos obtenidos. El DS total (grado de sustitución o grado de esterificación) es la suma de todos los alquilatos del metilglucósido o la proporción molar de éster:MeG.

25

TABLA 2: Equivalentes de diversos ésteres de alquilo del MeG

Producto		Equivalentes de ésteres de alquilo del MeG, determinados por RMN de H				
Ejemplo	MeG-alquilato	CC	Laurato	Oleato	Isoestearato	DS total
A	MeG-CCO	0,63		0,38		1,01
B	MeG-CCO	0,79		0,30		1,09
C	MeG-CCO	0,89		0,37		1,26
D	MeG-CCO	0,69		0,33		1,02
E	MeG-CCO	0,87		0,19		1,06
F	MeG-CCO	0,95		0,10		1,05
G	MeG-CCO	0,67		0,35		1,02
H	MeG-CCL	CC y L no distinguibles				1,02
I*	MeG-LO		0,69	0,34		1,03
J*	MeG-CC	1,05				1,05
K*	MeG-L		1,12			1,12
L*	MeG-L		1,17			1,17
M*	MeG-O			1,10		1,10
N*	MeG-I				1,13	1,13
O	MeG-CCO	0,67		0,29		0,96
P	MeG-CCO	0,81		0,44		1,25
Q	MeG-CCO	0,93		0,52		1,45
R*	MeG-L		0,92			0,92
*Comparativo						

2. PREPARACIÓN Y EVALUACIÓN DE COMPOSICIONES ESPESANTES ILUSTRATIVAS

- 5 Las composiciones tensioactivas acuosas ilustrativas se preparan mediante el espesamiento de una mezcla de tensioactivos al 12 % en peso compuesta por SLES2EO/CAPB/sal: en una proporción de 10:2:1 en peso, a pH 5,5. En todos estos ejemplos, se usa un 2,0 % en peso de espesante de MeG-alquiléster. La sal usada fue cloruro de sodio. El resto de la composición era agua.
- 10 Las composiciones tensioactivas espesadas se preparan de la siguiente manera: en un recipiente de formulación adecuado, a temperatura ambiente, usando un mezclador de paletas mecánico sencillo, se mezclan agua y el MeG-alquiléster, obteniéndose una dispersión lechosa. Se pesan los tensioactivos SLES2EO y CAPB y se mezclan hasta que se obtiene un líquido homogéneo, transparente. Finalmente, se añade 1,0 % en peso de sal de cloruro de sodio y se ajusta el pH a 5,5 con ácido cítrico. El éster de cadena corta de átomos de carbono usado en la formación del
- 15 MeG-alquiléster es una mezcla equimolar de ésteres de caprilato y caprato, CC, y la cadena de átomos de carbono larga es el éster de oleato, O. Las condiciones de reacción y la composición química de estos ésteres son como se ha señalado anteriormente.

- 20 La TABLA 3 demuestra las propiedades de espesamiento de tensioactivos de los ésteres de ácidos grasos de metilglucósido ilustrativos, donde se usa una combinación de ácidos de cadena de átomos de carbono corta y larga para preparar el espesante. Los datos de la tabla muestran la eficacia de espesamiento de los MeG-CCO-ésteres en función del aumento del contenido de éster de oleato de 0 a 0,52 equivalentes en el espesante.

TABLA 3: Composiciones tensioactivas

Ejemplo n.º	Composición química	Ácido de cadena de carbonos corta: CC	Ácido de cadena de carbonos larga: O	Turbidez del champú a TA	Visc. 20 rpm a 20 °C*	O/CC
		Equivalentes		UTN	mPa·s	eq/eq
1**	MeG-CC (Ej. J)	1,05	0,00	4,20	3,200	0,00
2	MeG-CCO (Ej. F)	0,95	0,10	3,39	3,375	0,11
3	MeG-CCO (Ej. E)	0,87	0,19	3,57	1,675	0,22
4	MeG-CCO (Ej. B)	0,79	0,30	12,79	7,412	0,38
5	MeG-CCO (Ej. O)	0,69	0,29	14,02	3,050	0,42
6	MeG-CCO (Ej. C)	0,89	0,37	60,00	7,800	0,42
7	MeG-CCO (Ej. D)	0,69	0,33	3,68	7,337	0,48
8	MeG-CCO (Ej. P)	0,81	0,44	24,20	7,450	0,54
9	MeG-CCO (Ej. Q)	0,93	0,52	43,25	8,300	0,56
10	MeG-CCO (Ej. A)	0,63	0,38	9,42	6,037	0,60

*Viscosidad medida a 20 °C, en formulaciones envejecidas a temperatura ambiente durante 24 horas.
**Comparativo

- 5 Los datos de la TABLA 3 indican que a medida que aumenta la proporción de los equivalentes de oleato con respecto a los equivalentes de caprilato-caprato (O/CC), la viscosidad de la composición tensioactiva acuosa tiende a aumentar de manera significativa. También se puede ver que a medida que aumenta la proporción de O/CC, la claridad de la formulación tiende a caer. Además, los aumentos en el nivel de oleato o cualquier otro éster de ácido graso de carbonos largo no siguen mejorando la viscosidad de las composiciones tensioactivas. Tanto la proporción de O/CC como el grado de sustitución parecen tener un efecto sobre la composición tensioactiva.
- 10 Los Ejemplos 11 a 15 son composiciones tensioactivas donde se añaden diversos tipos de ésteres de MeG de ácidos grasos de cadena de átomos de carbono larga a la composición para evaluar su eficacia espesante y el rendimiento generales. Estas formulaciones se preparan como para los Ejemplos 1-10 (con la mezcla tensioactiva al 12 % en peso compuesta de SLES2EO/CAPB/sal: en una proporción de 10:2:1 en peso, a pH 5,5), a excepción de que no se usaron ácidos grasos de cadena de átomos de carbono corta en estos ejemplos. La TABLA 4 indica que solo se obtiene un bajo efecto potenciador de la viscosidad. Además, a medida que aumenta el nivel de ácidos grasos de cadena más larga, se produce una caída significativa de la claridad de las formulaciones. La mayoría de estas composiciones son líquidos opacos muy turbios o simplemente lechosos. La mezcla de las composiciones a 55 °C no mejoró su viscosidad ni el aspecto. Todos ellos sufrieron la separación de fases en unas cuantas horas mientras reposaban a condiciones ambientales.
- 20

TABLA 4: Composiciones tensioactivas con MeG-éster de alquilo de cadena más larga

Ejemplo n.º	MeG - Éster de alquilo	Ácido de cadena de carbonos corta	Ácido de cadena de carbonos larga	Turbidez del champú a TA	Viscosidad a 20 rpm a 20 °C
		Equivalentes (grado de sustitución)		UTN	
11*	Monooleato de MeG (Ej. K)	no	1,10	398,13	1.200
12*	Monoisostearato de MeG (Ej. M)	no	1,13	112,00	320
13*	MeG-LO (Ej. L)	no	0,69/0,34	98,29	2.500
14*	MeG-dioleato (Emulsionante de dioleato Glucate™)	no	2,00	>500	30
15*	MeG-sesquiestearato (Emulsionante de sesquiestearato Glucate™)	no	1,5	>500	30

*Comparativo

Comparación de la estabilidad a largo plazo de la viscosidad de las composiciones tensioactivas

- 25 En general, se espera que las formulaciones tensioactivas presenten un comportamiento estable durante largos períodos de tiempo. Los espesantes adecuados usados para preparar las composiciones tensioactivas, por tanto,

deben ofrecer propiedades estables durante el envejecimiento. La TABLA 5 muestra las variaciones de viscosidad y de claridad de las composiciones tensioactivas acuosas preparadas con SLES2EO/CAPB/sal en las proporciones de 10:2:1, que se espesan con diferentes MeG-ésteres de alquilo.

- 5 En estos experimentos, se miden la viscosidad y la claridad de la formulación a 20 °C tras el envejecimiento de las composiciones a temperatura ambiente durante una hora (recién preparadas), a las 24 horas y tras un mes. Los datos de la TABLA 5 indican que el espesante de MeG-CC experimentó una pérdida de casi el 70 % de la viscosidad en un día de envejecimiento. Comparativamente, los espesantes de MeG-CCO presentan pequeñas variaciones en la viscosidad durante el envejecimiento, incluso después de un mes. Del mismo modo, la viscosidad de las
10 composiciones espesadas con MeG-monolaurato sigue siendo relativamente estable después de un mes, aunque su claridad sigue siendo baja, con respecto a las composiciones espesadas con MeG-CCO.

Si bien el mecanismo de la falta de estabilidad de las composiciones de MeG-CC no se entiende bien, puede deberse a las interacciones complejas con las moléculas de tensioactivo que pueden dar lugar a cambios de fase en
15 solución o incluso a degradación del espesante.

Esto sugiere que los espesantes a base de una mezcla de ésteres de ácidos grasos cortos y largos de metilglucósido tales como MeG-CCO pueden ofrecer una combinación deseable de propiedades de rendimiento en
20 las composiciones tensioactivas.

TABLA 5: Ensayos de envejecimiento en las composiciones tensioactivas

Ejemplo n.º	MeG-éster de alquilo	Viscosidad 1 h	Viscosidad 24 h	Viscosidad 1 mes	Turbidez 1 h	Turbidez 24 h	Turbidez 1 mes
		mPa·s	mPa·s	mPa·s	UTN	UTN	UTN
16*	MeG-CC (Ej. J)	10.100	3.200	2.200	4,80	4,20	4,20
17	MeG-CCO (Ej. D)	7.540	7.337	6.800	4,20	3,68	4,40
18	MeG-CCO (Ej. C)	7.910	7.800	7.850	55,0	60,0	32,0
19*	MeG-L (Ej. R)	7.500	7.225	6.012	>500	>500	300
20*	MeG-L (Ej. K)	6.320	6.725	5.900	>500	>500	320
*Comparativo							

3. EJEMPLOS DE COMPOSICIONES DE CHAMPÚ

- 25 Los Ejemplos 21 a 30 mostrados en la TABLA 6 son composiciones tensioactivas acuosas que se preparan mediante el espesamiento de una mezcla tensioactiva al 14 % en peso compuesta por SLES2EO/CAPB en una proporción de 10:4, a pH 5,7. En estos ejemplos, se añaden diversos niveles del espesante de MeG-CCO del Ejemplo A. La preparación de la composición tensioactiva espesada es la siguiente: en un recipiente de formulación adecuado, a temperatura ambiente, usando un mezclador de paletas mecánico sencillo, se mezclan agua y el MeG-
30 éster de alquilo, obteniéndose una dispersión lechosa. Se pesan los tensioactivos SLES2EO y CAPB y se mezclan hasta que se obtiene un líquido homogéneo, transparente. Los Ejemplos 21 a 25 se preparan sin el uso de sal. Los Ejemplos 26 a 30 se preparan con sal de cloruro de sodio. Se ajusta el pH con ácido cítrico.

Las composiciones consiguen viscosidad superior a 2.000 mPa·s a más del 3 % en peso de espesante. Sin embargo, cuando se añade una pequeña cantidad de NaCl a las composiciones, se alcanzan aumentos significativos en la viscosidad, como se ilustra en los Ejemplos 31 a 35. En este caso, se puede lograr una viscosidad superior a 2.000 mPa·s a concentraciones de MeG-CCO de ~ 2 % en peso. Los ejemplos de la TABLA 6 demuestran la compatibilidad de la sal y las propiedades sinérgicas de MeG-CCO con los electrolitos.

40

TABLA 6: Efecto de MeG-CCO y sal en composiciones tensioactivas

Ejemplo n.º	% en peso de MeG-CCO	% en peso de NaCl	Turbidez, UTN	Viscosidad, mPa·s a 20 rpm
21*	0	0	5	100
22	1	0	5	200
23	2	0	5	387

Ejemplo n.º	% en peso de MeG-CCO	% en peso de NaCl	Turbidez, UTN	Viscosidad, mPa·s a 20 rpm
24	3	0	5	1.975
25	4	0	5,5	5.087
26*	0	0,20	5	100
27	1	0,20	5	462
28	2	0,20	5	3.275
29	3	0,20	5	5.837
30	4	0,20	5	8.650
*Ejemplo comparativo				

4. EJEMPLOS DE COMPOSICIONES DE CHAMPÚ O DE JABÓN CORPORAL EXENTAS DE PEG

- 5 Los Ejemplos 31 a 36 de la TABLA 7 son composiciones tensioactivas acuosas que se preparan mediante el espesamiento de una mezcla tensioactiva al 14 % en peso compuesta de SLS/CAPB: a una proporción en peso de 10:4, a pH 5,7. En estos ejemplos, se añaden diversos niveles del espesante de MeG-CCO del Ejemplo A. La preparación de la composición tensioactiva espesada es la siguiente: en el recipiente de formulación adecuado, a temperatura ambiente, usando un mezclador de paletas mecánico sencillo, se mezclan agua y el MeG-éster de alquilo, obteniéndose una dispersión lechosa. Se pesan los tensioactivos SLS y CAPB, y se mezclan hasta que se obtiene un líquido homogéneo, transparente. En estos ejemplos, no se añade sal de cloruro de sodio, aunque se ha de apreciar que se puede añadir la sal de cloruro de sodio, y el pH se ajusta con un ácido (por ejemplo, ácido cítrico).
- 10
- 15 Los ejemplos 31 a 36 demuestran la eficacia de espesamiento de MeG-CCO en el sistema tensioactivo de SLS (tensioactivo aniónico)/CAPB. Se obtienen fácilmente composiciones claras y viscosidades superiores a 2.000 mPa·s a ~0,25 % en peso del espesante, y las composiciones no necesitaron sal. Al 2 % en peso de espesante, la formulación se volvió lechosa y presentó una pérdida de la viscosidad. Como se apreciará, se podrían preparar curvas de concentración y sal detalladas para ajustar la viscosidad final de la composición durante el desarrollo y el procesamiento de la formulación.
- 20

TABLA 7: Composiciones tensioactivas exentas de PEG con tensioactivo aniónico

Ejemplo n.º	% en peso de MeG-CCO	% en peso de NaCl	Turbidez, UTN	Viscosidad, mPa·s a 20 rpm
31*	0	0	4	100
32	0,25	0	5	1.887
33	0,5	0	5	2.850
34	0,75	0	5	2.625
35	1,00	0	5,5	25.000
36	2,00	0	>500	100
*Ejemplo comparativo				

5. EJEMPLOS DE COMPOSICIONES DE CHAMPÚ Y JABÓN CORPORAL VERDES, EXENTAS DE PEG

- 25 Los Ejemplos 37 a 41 de la TABLA 8 son composiciones tensioactivas acuosas que se preparan mediante el espesamiento de una mezcla de tensioactivos al 12 % en peso de tensioactivos, renovables o verdes, exentos de PEG compuestos de SLS/cocobetaina a una proporción en peso de 10:2, a un pH de 5,5.
- 30 En estos ejemplos, se añaden diversos niveles del espesante de MeG-CCO del Ejemplo D. La preparación de la composición tensioactiva espesada es la siguiente: en un recipiente de formulación adecuado, a temperatura ambiente, usando un mezclador de paletas mecánico sencillo, se mezclan agua (en cantidad suficiente hasta 100) y el MeG-éster de alquilo, obteniéndose una dispersión lechosa. Se pesan los tensioactivos de SLS y cocobetaina, y se mezclan hasta que se obtiene un líquido homogéneo, transparente. Opcionalmente, se añade sal de cloruro de sodio y se ajusta el pH con ácido cítrico.
- 35
- Los Ejemplos 37 a 41 demuestran la eficacia de espesamiento de MeG-CCO en el sistema tensioactivo de SLS/CAPB. Se obtuvieron fácilmente composiciones transparentes con viscosidades superiores a 2.000 mPa·s a diversas concentraciones del espesante. Los ejemplos también demuestran la gran versatilidad del espesante de MeG-CCO para conseguir composiciones transparentes y altamente viscosas como se desea, simplemente ajustando la concentración de espesante y de sal.
- 40

TABLA 8: Sistema tensioactivo verde, exento de PEG, con tensioactivos aniónicos y zwitteriónicos

Ejemplo n.º	% en peso de MeG-CCO	% en peso de NaCl	Turbidez, UTN	Viscosidad, mPa·s a 20 rpm
37*	0	1,0	5,00	100
38	1,0	1,0	3,00	5.987
39	1,0	2,0	7,27	12.325
40	2,0	1,0	10,00	10.462,0
41	3,0	0,5	4,32	10.937
*Ejemplo comparativo				

6. EJEMPLOS DE COMPOSICIONES DE CHAMPÚ Y JABÓN CORPORAL VERDES, EXENTAS DE SULFATOS Y EXENTAS DE PEG

5 Los Ejemplos 42 a 44 de la TABLA 9 son composiciones tensioactivas acuosas que se prepararon mediante el espesamiento de una mezcla de tensioactivos exentos de sulfatos al 14 % en peso de tensioactivo total. La mezcla se compone de SCAA/CAPB/DSLSS en una proporción en peso de 5:5:4 a pH 5,45. En estos ejemplos, se añadió espesante de MeG-CCO al 1 %. El espesante usado en estas composiciones era un MeG-CCO formado de manera análoga al Ejemplo B.

10 La preparación de la composición tensioactiva espesada fue la siguiente: en un recipiente de formulación adecuado, a temperatura ambiente, usando un mezclador mecánico de paletas sencillo, se mezclaron agua y el MeG-éster de alquilo, obteniéndose una dispersión lechosa. Se pesaron SCAA, CAPB y DSLSS, y se mezclaron hasta que se obtuvo un líquido homogéneo, transparente. Opcionalmente, se puede añadir sal de cloruro de sodio y ajustarse el pH con ácido cítrico.

15 El Ejemplo 42 es un ejemplo de una formulación limpiadora, exenta de sulfatos, clara y viscosa. El Ejemplo 43 es una formulación nacarada que usa mica de oro para lograr el efecto. Esta formulación es estable a alta temperatura (45 °C) durante un mes. El Ejemplo 44 es una formulación nacarada exenta de sulfatos que usa una dispersión acuosa de diestearato de etilenglicol para lograr el efecto. Esta formulación es estable durante tres meses a temperatura elevada (45 °C). La TABLA 9 muestra las partes en peso, las formulaciones se componen de 100 partes con agua DI. Ninguna de estas formulaciones requiere el uso de sal para obtener una viscosidad superior a 2.000 mPa s.

TABLA 9: Composiciones tensioactivas verdes, exentas de sulfato y exentas de PEG

Ejemplo n.º	MeG-CCO	Mica	Quick Pearl	Colorante azul n.º 1 FD&C (solución al 0,1 %)	Conservante Germall II	Turbidez (UTN)	Viscosidad, mPa·s a 20 rpm
42	1,00					8,2	9.000
43	1,00	0,10		0,1	0,25	nd	6.850
44	2,00		2,00		0,25	nd	3.200

7. EJEMPLO DE JABÓN CORPORAL EXENTO DE PEG Y EXENTO DE SULFATOS

30 El Ejemplo 45 es un ejemplo de un jabón corporal exento de PEG y exento de sulfatos que contiene un sistema tensioactivo de SOS/CAPB/AOS al 19,4 % en una proporción en peso de 12:5,25:2,15, preparado como se ha descrito anteriormente.

TABLA 11: Jabón corporal exento de PEG y exento de sulfatos (Ejemplo 45)

Ingrediente	Partes activas	% de actividad	pph
Sulfonato de olefina C ₁₄₋₁₆ de sodio (SOS)	12	39,0	30,77
CAPB	5,25	35,0	15,00
Alfa-sulfometil C ₁₂₋₁₆ de sodio (AOS)	2,15	47,0	4,62
MeG - CCO (Ej. B)	2,00	100,0	2,11
NaCl	1,00	100	1,00
Ácido cítrico		25	-
Agua			46,50
TOTAL			100,00
Turbidez, UTN	6,37		

Ingrediente	Partes activas	% de actividad	pph
Viscosidad, mPa·s a 20 rpm	11.475		

- 5 A menos que se indique lo contrario, cada producto químico o composición química a la que se hace referencia en el presente documento debe interpretarse como un material de calidad comercial que puede contener los isómeros, subproductos, derivados y otros materiales que normalmente se entiende que están presentes en la calidad comercial. Sin embargo, la cantidad de cada componente químico se presenta excluyendo cualquier disolvente o aceite diluyente, que puede estar habitualmente presente en el material comercial, a menos que se indique lo contrario.
- 10 Como se usa en el presente documento, la expresión "que consiste esencialmente en" permite la inclusión de sustancias que no afectan materialmente a las características básicas y nuevas de la composición considerada.
- 15 Como se usa en el presente documento, la expresión "que consiste en" permite la inclusión de solo los elementos enumerados en el mismo, a excepción de los presentes como resultado de impurezas en los materiales usados como reactivos.
- "Predominantemente", como se usa en el presente documento, significa superior al 60 %, o superior al 80 %, o superior al 90 %.
- 20 Los polímeros y las composiciones que se divulgan en el presente documento pueden adecuadamente comprender, consistir en o consistir esencialmente en los componentes, los elementos y las descripciones de los procesos que se describen en el presente documento. Los polímeros y las composiciones divulgados en el presente documento a modo de ejemplo pueden formarse adecuadamente en ausencia de cualquier elemento que no se divulgue específicamente en el presente documento.
- 25 A menos que se indique lo contrario, todos los porcentajes, las partes y las proporciones que se expresan en el presente documento se basan en el peso de la composición total.
- 30 Como se usa en el presente documento, cualquier miembro de un género (o lista) se puede excluir de las reivindicaciones.
- Como se usa en el presente documento, el término "(met)acrílico" y otros términos relacionados incluyen tanto grupos acrílicos como grupos metacrílicos.

REIVINDICACIONES

1. Una composición que comprende:

5 un tensioactivo;
un modificador de la reología que comprende una mezcla de ésteres de ácidos grasos de alquilglucósido que comprende:

10 un éster de ácido graso de cadena larga de un alquilglucósido, consistiendo el éster de ácido graso de cadena larga en al menos un grupo éster de ácido graso $R^1(O)O-$, donde R^1 es un hidrocarburo C_{12} o superior, y
un éster de ácido graso de cadena corta de un alquilglucósido, consistiendo el éster de ácido graso de cadena corta en al menos un grupo éster de ácido graso $R^2(O)O-$, donde R^2 es un hidrocarburo C_6-C_{10} ; y

15 agua;

donde la proporción molar de los grupos éster de ácido graso de cadena larga con respecto a los grupos éster de ácido graso de cadena corta del modificador de la reología es inferior a 1:1.

20 2. La composición de la reivindicación 1, donde, en el éster de ácido graso de cadena larga, R^1 es un hidrocarburo $C_{12}-C_{23}$.

3. La composición de la reivindicación 1, donde el éster de ácido graso de cadena corta comprende al menos un grupo éster de ácido graso $R^2(O)O-$, donde R^2 es un hidrocarburo C_8-C_{10} .

25 4. La composición de la reivindicación 1, donde una proporción de los grupos éster de ácido graso de cadena larga con respecto a los grupos éster de ácido graso de cadena corta del modificador de la reología es inferior a 0,1:1.

30 5. La composición de la reivindicación 1, donde el éster de ácido graso de cadena larga comprende grupos éster oleico de origen vegetal, y el éster de ácido graso de cadena corta comprende grupos éster caprílico y cáprico, y donde una proporción molar de los grupos éster C_{18} insaturados con respecto a otros grupos éster (proporción de O/CC) es de 0,2:1 a 0,7:1.

35 6. La composición de la reivindicación 1, que comprende además un disolvente no acuoso.

7. La composición de la reivindicación 1, donde el modificador de la reología está presente a una concentración de al menos el 0,1 % en peso.

40 8. La composición de la reivindicación 1, donde el tensioactivo está presente a una concentración de al menos el 0,01 % en peso.

9. La composición de la reivindicación 1, donde una proporción en peso de los ésteres de ácidos grasos de alquilglucósido con respecto al tensioactivo es inferior a 1:1.

45 10. La composición de la reivindicación 1, donde la composición comprende al menos el 40 % en peso de agua.

50 11. Un producto para el cuidado personal seleccionado entre un champú, un jabón corporal, un jabón líquido, un limpiador facial y un jabón de manos, donde el producto para el cuidado personal comprende la composición definida en una o más de las reivindicaciones 1 a 10.

55 12. Una composición que comprende un modificador de la reología derivado de una reacción de un alquilglucósido con un ácido graso de cadena larga o derivado del mismo y un ácido graso de cadena corta o derivado del mismo, incluyendo los ácidos grasos de cadena corta o de cadena larga, o sus derivados, una cadena de hidrocarburo de al menos 6 átomos de carbono de longitud, y donde los ácidos grasos de cadena corta y de cadena larga, o sus derivados, difieren en la longitud de sus respectivas cadenas de hidrocarburo en una media de al menos 6 átomos de carbono, donde una proporción molar del ácido graso de cadena larga o su derivado con respecto al ácido graso de cadena corta o su derivado es inferior a 1:1.

FIG. 1

